**UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

# Magnetismo, transporte electrónico y desorden en sistemas fuertemente correlacionados

Tesis presentada para optar por el título de

Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el Área Ciencias Físicas

**Lic. Joel Iván Bobadilla**

Director: Dr. Alberto Camjayi

Consejera de Estudios: Dra. Diana Skigin

Buenos Aires, año 2026

Defensa realizada el 16 de abril de 2026

# Magnetismo, transporte electrónico y desorden en sistemas fuertemente correlacionados

En esta tesis se estudia la respuesta magnética, espectral y de transporte de sistemas electrónicos fuertemente correlacionados, con especial énfasis en el modelo de Hubbard y sus extensiones relevantes para describir materiales reales. Mediante el uso de la teoría de campo medio dinámico (DMFT) se analizan distintos regímenes de interacción, temperatura, dopaje y campo magnético, poniendo en evidencia el rol central de las correlaciones locales en la reconstrucción espectral y en la aparición de respuestas de transporte no triviales.

En el contexto del modelo de Hubbard antiferromagnético bajo campo magnético, se caracteriza la magnetorresistencia y el metamagnetismo local, identificando la coexistencia de escalas de energía asociadas a grados de libertad de carga y de espín. Se demuestra además la existencia de un mecanismo mínimo, de origen puramente correlacionado, capaz de generar transporte de carga polarizado en espín en antiferromagnetos colineales estructuralmente convencionales, controlado por la ruptura conjunta de simetrías de partícula–hueco y de equivalencia entre subredes.

Finalmente, se aplican estas ideas al estudio de materiales reales con fuerte acoplamiento espín–órbita, como los iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$, y a sólidos de nanopartículas dominados por bloqueo de Coulomb y desorden, mostrando cómo conceptos desarrollados en modelos de red correlacionados permiten interpretar de manera unificada fenómenos de transición metal–aislante y reconstrucción espectral en sistemas complejos.

**Palabras claves:** sistemas fuertemente correlacionados; modelo de Hubbard; DMFT; magnetorresistencia; espintrónica antiferromagnética; transición metal–aislante; desorden.

# Magnetism, electronic transport and disorder in strongly correlated systems

This thesis investigates the magnetic, spectral, and transport properties of strongly correlated electronic systems, with a primary focus on the Hubbard model and its extensions relevant for real materials. Within the dynamical mean-field theory (DMFT) framework, different regimes of interaction strength, temperature, doping, and magnetic field are explored, highlighting the central role of local electronic correlations in shaping spectral reconstruction and nontrivial transport responses.

For the antiferromagnetic Hubbard model under a Zeeman field, magnetoresistance and local metamagnetism are characterized, revealing the coexistence of distinct energy scales associated with charge and spin degrees of freedom. A minimal, purely correlation-driven mechanism for generating spin-polarized charge transport in structurally conventional collinear antiferromagnets is identified, controlled by the simultaneous breaking of particle–hole symmetry and antiferromagnetic sublattice equivalence.

Finally, these concepts are applied to correlated materials with strong spin–orbit coupling, such as $Sr_2IrO_4$ and $Sr_3Ir_2O_7$, and to nanoparticle solids dominated by Coulomb blockade and disorder. The results show how ideas developed in correlated lattice models provide a unified interpretation of metal–insulator transitions and spectral reconstruction in complex systems.

**Keywords:** strongly correlated systems; Hubbard model; DMFT; magnetoresistance; antiferromagnetic spintronics; metal–insulator transition; disorder.

# Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a mi director de tesis, Alberto Camjayi, por su acompañamiento constante a lo largo de todo este trabajo, por las discusiones científicas, la libertad para explorar ideas propias y la confianza depositada en este proyecto. Su guía fue fundamental tanto en el desarrollo conceptual de la tesis como en la formación de un criterio de investigación propio.

Agradezco también a mi consejera de estudios, Diana Skigin, por el seguimiento académico y el apoyo institucional durante el doctorado. Asimismo, agradezco a los miembros del jurado por el tiempo dedicado a la lectura crítica de esta tesis y por sus valiosos comentarios y sugerencias.

Agradezco al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UBA) por el entorno académico en el que se desarrolló este trabajo, así como a las instituciones que brindaron soporte financiero y computacional para la realización de esta investigación.

Finalmente, quiero agradecer a mi familia y en especial a mi compañera, Joana, por el apoyo sostenido durante estos años de trabajo, por la paciencia en los momentos de mayor exigencia y por acompañarme de manera incondicional a lo largo de este maravilloso proceso.

*Dedico este trabajo a mis padres, Romualdo y Angélica, quienes supieron inculcar en mí el aprecio por el conocimiento y la cultura. Ese aprendizaje temprano fue una semilla que, con el paso del tiempo, dio entre sus frutos principales el desarrollo de este trabajo.*

*¡Nuevamente muchas gracias a ambos!*

# Índice

**1. Modelos para la descripción de sistemas fuertemente correlacionados 4**

1.1. El modelo de Hubbard . . . . . 4

1.1.1. Formulación del modelo . . . . . 5

1.1.2. Regímenes de acoplamiento . . . . . 5

1.1.3. Más allá del llenado mitad: Efectos del dopado . . . . . 10

1.2. El modelo de la impureza de Anderson . . . . . 14

**2. Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) 17**

2.1. El concepto de campo medio . . . . . 17

2.1.1. Campo medio de Weiss para el modelo de Ising . . . . . 17

2.1.2. Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) . . . . . 19

2.2. Límites en que DMFT es exacto . . . . . 23

2.2.1. Dos límites simples: el límite atómico y el límite de no interacciones . . . 23

2.2.2. Límite de número de coordinación infinito . . . . . 23

2.3. DMFT en una red bipartita . . . . . 27

2.3.1. Caso general . . . . . 27

2.3.2. Orden antiferromagnético . . . . . 29

2.4. DMFT en sistemas con desorden . . . . . 30

2.4.1. Extensión natural al problema con desorden . . . . . 31

2.4.2. Teoría del Medio Típico (TMT) . . . . . 32

2.4.3. DMFT Estadística (statDMFT) . . . . . 34

**3. Cálculo de la conductividad en DMFT 37**

3.1. El Método de Máxima Entropía (MaxEnt) . . . . . 37

3.1.1. El problema de la continuación analítica . . . . . 37

3.1.2. Regularización mediante la entropía . . . . . 38

3.1.3. Ventajas y limitaciones . . . . . 39

3.2. Cálculo de la conductividad DC . . . . . 40

3.2.1. Derivación del operador corriente . . . . . 40

3.2.2. Fórmula de Kubo para la conductividad DC . . . . . 42

3.2.3. Aplicación a la red hipercúbica de dimensión infinita . . . . . 49

**I. Propiedades magnéticas y de transporte del modelo de Hubbard antiferromagnético 51**

**4. Magnetorresistencia en el modelo de Hubbard Antiferromagnético 53**

4.1. Magnetorresistencia: concepto y clasificación . . . 53
4.1.1. Magnetorresistencia ordinaria (OMR) . . . 54
4.1.2. Magnetorresistencia gigante (GMR) . . . 54
4.1.3. Magnetorresistencia colosal (CMR) . . . 56
4.1.4. Magnetorresistencia túnel (TMR) . . . 56
4.1.5. Interés en los sistemas antiferromagnéticos . . . 57
4.2. Modelo y formulación teórica . . . 57
4.2.1. El modelo . . . 58
4.2.2. Solución mediante DMFT . . . 59
4.2.3. Implementación numérica . . . 60
4.3. Resultados y discusión . . . 60
4.3.1. Dependencia con la temperatura . . . 60
4.3.2. Dependencia con la intensidad del campo magnético . . . 65
4.4. Conclusiones . . . 69

**5. Espintrónica en el modelo de Hubbard antiferromagnético 71**

5.1. Antiferromagnetos como plataforma emergente en espintrónica . . . 71
5.2. Modelo e implementación numérica . . . 74
5.3. Implicaciones de la simetría partícula–hueco . . . 75
5.3.1. Simetría partícula–hueco pura . . . 75
5.3.2. Simetría combinada partícula–hueco e inversión de espín (PHsp) . . . 75
5.3.3. Consecuencias para funciones de Green y funciones espectrales . . . 76
5.4. Ruptura de simetrías y polarización de la conductividad DC . . . 77
5.5. Dependencia con el dopaje y la intensidad de campo magnético . . . 80
5.6. Efectos térmicos . . . 86
5.7. Conclusiones . . . 88

**6. Metamagnetismo en el modelo de Hubbard antiferromagnético 90**

6.1. Relevancia del metamagnetismo localizado . . . 90
6.2. Modelo e implementación numérica . . . 91
6.3. Resultados y Discusión . . . 92
6.4. Conclusiones . . . 99

**II. Aplicaciones del modelo de Hubbard a sistemas complejos 101**

**7. Evolución espectral con el dopaje en la transición magnética de los iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$ 103**

7.1. Modelo y metodología . . . . . 104
7.2. Comportamiento de la resistividad . . . . . 105
7.3. Evolución de las líneas espectrales . . . . . 106
7.4. Conclusiones . . . . . 110

**8. Bloqueo de Coulomb y transición metal-aislante en sólidos de nanopartículas 112**

8.1. Confinamiento cuántico y bloqueo de Coulomb . . . . . 113
8.2. Fase localizada: simulaciones HiNTS y comparación con experimentos . . . . . 114
8.3. Fase deslocalizada: descripción mediante DMFT multiorbital . . . . . 118
8.3.1. Motivación del modelo multiorbital con desorden . . . . . 118
8.3.2. Modelo y formulación de DMFT . . . . . 118
8.3.3. Resultados y discusión . . . . . 120
8.4. Conclusiones . . . . . 122

**9. Conclusiones generales 124**

**A. Relación entre las fases paramagnética y antiferromagnética del modelo de Hubbard 127**

A.1. Función de Green local en el modelo paramagnético . . . . . 127
A.2. Función de Green en el modelo antiferromagnético . . . . . 128
A.3. Condición de anidamiento perfecto (*perfect nesting*) . . . . . 130
A.3.1. El modelo paramagnético como caso particular del modelo antiferromagnético 131
A.3.2. Auto-consistencia en DMFT para redes bipartitas . . . . . 132

**Bibliografía 132**

# Introducción

En muchos sólidos, las propiedades físicas de los electrones pueden describirse, en buena aproximación, asumiendo una imagen de electrón independiente. Este enfoque resulta particularmente útil en sistemas con bandas de energía anchas, asociadas a valores grandes de la energía cinética. En estos sistemas, los electrones son predominantemente itinerantes: estos se deslocalizan sobre todo el sólido, manifestando un carácter ondulalorio. El tiempo típico durante el cual los electrones se encuentran cerca de un átomo específico de la red cristalina es muy corto.

Para algunos materiales, sin embargo, esta imagen puede conducir a resultados equivocados. Esto ocurre generalmente en sistemas con valores moderados del ancho de banda, en los que el cociente entre la repulsión de Coulomb y la energía cinética disponible se hace mayor. En estos sistemas, los electrones "se ven unos con otros", y las correlaciones estadísticas entre sus movimientos se tornan importantes. La reducción en el valor de la energía cinética implica un tiempo típico mayor alrededor de un ion específico de la red, y por lo tanto, una mayor tendencia hacia la localización. En casos extremos, la localización puede resultar incluso favorable energéticamente, y el sólido se convierte en un aislante. Este tipo de aislantes no se debe a la ausencia de estados disponibles —como ocurre en los aislantes de banda convencionales— sino al bloqueo impuesto por la interacción de Coulomb entre electrones. El mecanismo detrás de esta fenomenología fue entendido a mediados del siglo pasado por Mott y Peierls [1–3], y es por esto que este tipo de aislantes se denomina aislantes de Mott[1]. En algunos sistemas, esta localización afecta solo a parte de los electrones (por ejemplo, a los correspondientes a una capa $f$) y entonces el sólido permanece en un estado metálico, aunque fuertemente correlacionado.

La situación más interesante ocurre en las escalas de energía intermedias, en donde el carácter localizado de las escalas de tiempo cortas coexiste con el carácter itinerante de las escalas de tiempo largas. Esta situación da lugar a competencias entre distintas inestabilidades del gas de electrones, a menudo con muy poca diferencia de energía entre ellas. Comprender estas escalas de energía intermedias es la clave para entender la física intrigante que suele observarse en los sistemas correlacionados.

[1] Peierls advirtió tempranamente que la teoría de electrones independientes podía fallar en sistemas con electrones localizados, sugiriendo que la interacción podía suprimir la conductividad incluso con una banda parcialmente llena. Mott formalizó este mecanismo y mostró que la repulsión de Coulomb local puede bloquear la movilidad electrónica, dando lugar a la transición metal–aislante hoy denominada transición de Mott.

En la práctica, los materiales fuertemente correlacionados están generalmente asociados a capas $d$ o $f$ parcialmente ocupadas, y por lo tanto, a sistemas que involucran:

- Metales de transición (particularmente los de tipo $3d$ desde el Ti al Cu, y los menos extendidos $4d$ desde el Zr a la Ag).
- Tierras raras ($4f$ desde el Ce al Yb) o elementos actínidos ($5f$ desde Th al Lr).

A esta lista deben añadirse también los conductores moleculares (orgánicos) con grandes volúmenes de celda unitaria, en los cuales el solapamiento entre orbitales moleculares es débil[2].

La restricción cuántica $l \leq n-1$, garantiza que los orbitales $3d$, con $l=2$ y $n=3$, sean ortogonales a todos los orbitales más internos (con $n=1$ y $n=2$) exclusivamente debido a su dependencia angular. Como consecuencia, la parte radial de estas funciones de onda no necesita presentar nodos ni extenderse significativamente para asegurar la ortogonalidad, lo que resulta en una mayor localización espacial cerca del núcleo en comparación con los orbitales $s$ o $p$ de energía comparable (es decir, con valores similares de $n$). Esta mayor localización conduce a un menor solapamiento con orbitales vecinos en la red cristalina, lo que implica una reducción de la energía cinética disponible para los electrones y un aumento relativo de la repulsión de Coulomb local. Un argumento análogo se aplica a los orbitales $4f$ en las tierras raras. En cambio, las funciones de onda de los orbitales $4d$ y $5f$ son más extendidas, lo que favorece un mayor solapamiento entre sitios vecinos, una mayor itinerancia electrónica y, en general, efectos de correlación más débiles en comparación con los orbitales $3d$ y $4f$.

Aunque simplificados, estos argumentos cualitativos nos indican que una escala de energía clave en el problema es el grado de solapamiento entre los orbitales de sitios atómicos vecinos. Una estimación simple de este solapamiento está dada por el elemento de matriz,

$$t_{LL'}^{RR'} \sim \int d^3\mathbf{r}\, \chi_L^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \chi_{L'}(\mathbf{r}-\mathbf{R}'),$$

en donde, la función de onda $\chi_L(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ debe entenderse como una función tipo Wannier centrada en el sitio atómico $\mathbf{R}$ asociada al orbital $L$. Este solapamiento determina el ancho de banda (típicamente del orden de unos pocos eV en sistemas de banda angosta) y el orden de magnitud de la energía cinética.

Otro parámetro clave es la intensidad típica de la repulsión de Coulomb entre electrones que ocupan los orbitales más localizados. La mayor repulsión ocurre cuando dos electrones con espines opuestos ocupan el mismo orbital, esta es la repulsión de Hubbard, que puede estimarse

[2]En muchos materiales orgánicos conductores, las moléculas son grandes (lo que implica grandes volúmenes de la celda unitaria) y están débilmente entrelazadas entre sí. Esto implica una movilidad electrónica reducida, y que las interacciones de tipo electrón-electrón locales se vuelvan relativamente más importantes (dando lugar a efectos de correlación fuertes). Ejemplos de este tipo de materiales son las sales BEDT-TTF o los fullerenos dopados.

mediante,

$$U \sim \int d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{r}'\, |\chi_L(\mathbf{r}-\mathbf{R})|^2\, U_s(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, |\chi_L(\mathbf{r}'-\mathbf{R})|^2.$$

En esta expresión, $U_s$ representa la interacción efectiva entre electrones, incluyendo los efectos de apantallamiento debidos al resto de los electrones del sólido [3]. El valor típico de $U$ es de unos pocos eV en sistemas fuertemente correlacionados. Este valor puede ser comparable con el de la energía cinética cuando el ancho de banda es reducido, lo que da lugar a una competencia entre tendencias a la localización y a la itinerancia de los electrones.

A partir de esta discusión, resulta claro que el modelo más simple en el cual puede abordarse la física de las correlaciones fuertes es el de una red de "átomos" con un único nivel electrónico, o equivalentemente, una sola banda de tipo tight-binding (asociada a orbitales de Wannier centrados en los sitios de la red cristalina), conservando únicamente el término de interacción local entre electrones de espines opuestos. El Hamiltoniano asociado a este modelo se escribe como:

$$H = -\sum_{\langle R,R'\rangle,\sigma} t_{RR'}\, c^{\dagger}_{R\sigma} c_{R'\sigma} + U \sum_{R} n_{R\uparrow} n_{R\downarrow},$$

en donde el símbolo $\langle R, R'\rangle$ indica que la suma es sobre primeros vecinos. Este modelo corresponde al famoso modelo de Hubbard [4–6]. Dentro del estudio de los sistemas fuertemente correlacionados, este modelo cumple un rol análogo al que desempeña el modelo de Ising en la mecánica estadística: funciona como un laboratorio conceptual para poner a prueba tanto ideas físicas como métodos teóricos. A pesar de contar ya con más de 60 años de historia, estamos todavía lejos de haber comprendido por completo todos los fenómenos físicos que encierra este modelo, y mucho menos de poder realizar cálculos confiables en todos los regímenes de parámetros que abarca.

La presente tesis busca ampliar los conocimientos que se tienen hasta el momento sobre este modelo. En la misma se analizan tanto propiedades fundamentales como posibles aplicaciones a sistemas concretos de interés experimental. La tesis se organiza en dos partes complementarias. La primera se centra en el estudio detallado del modelo de Hubbard antiferromagnético bajo campo magnético, analizando la respuesta magnética y de transporte en distintos regímenes de temperatura, dopaje e intensidad del campo. La segunda parte explora cómo los conceptos emergentes de este modelo pueden aplicarse a materiales complejos de interés experimental, incluyendo compuestos con fuerte acoplamiento espín–órbita y sólidos formados por nanopartículas, donde la interacción electrónica y el desorden desempeñan un papel crucial. En ambos casos, se hace uso de herramientas teóricas y numéricas modernas, como la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT), para estudiar de manera coherente la competencia entre itinerancia, interacción y desorden, y su impacto en la aparición de fenómenos colectivos en materiales fuertemente correlacionados.

[3] El apantallamiento es un efecto que puede ser muy grande, si en lugar de $U_s$ utilizaramos $U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ para estimar la repulsión coulombiana, obtendríamos típicamente valores del orden de decenas de electronvolts, muy por encima, de los valores habituales para este tipo de sistemas.

# 1. Modelos para la descripción de sistemas fuertemente correlacionados

La enorme complejidad de los fenómenos naturales impone, como primer paso en toda explicación científica, la necesidad de realizar simplificaciones adecuadas. Estas simplificaciones —basadas en la idealización y la abstracción— constituyen el núcleo del enfoque reduccionista, y se materializan en la formulación de modelos. Un modelo es una construcción teórica que busca capturar los aspectos esenciales de un sistema físico, omitiendo aquellos detalles considerados irrelevantes o secundarios para el fenómeno bajo estudio. Esta estrategia ha demostrado ser extraordinariamente eficaz en múltiples ramas de la ciencia, y de manera particularmente notable en la física.

En el campo de la física del estado sólido, el uso de modelos ha permitido racionalizar una gran variedad de fenómenos, desde la formación de bandas electrónicas hasta la aparición de fases colectivas como el magnetismo y la superconductividad. Sin embargo, la descripción adecuada de ciertos materiales —especialmente aquellos en los que las interacciones electrón-electrón juegan un rol central— requiere el uso de modelos capaces de capturar los efectos de la correlación electrónica de manera no trivial.

Este capítulo está dedicado al estudio de dos modelos paradigmáticos para sistemas fuertemente correlacionados. En primer lugar, se desarrolla el modelo de Hubbard, que constituye el punto de partida para describir la competencia entre itinerancia e interacción en electrones de banda estrecha. Se presentan su formulación general, los regímenes físicos que emergen en función de la relación entre los parámetros del modelo, y las fases características que se observan al dopar el sistema fuera del llenado mitad. En segundo lugar, se introduce el modelo de la impureza de Anderson, el cual permite describir fenómenos de localización electrónica en presencia de un entorno itinerante. Este modelo resulta clave para la formulación de la teoría de campo medio dinámico (DMFT), que será desarrollada en profundidad en el capítulo siguiente.

## 1.1. El modelo de Hubbard

Durante buena parte del siglo XX, la física del estado sólido carecía de un modelo microscópico capaz de describir de manera convincente el magnetismo en metales —en particular, el

ferromagnetismo observado en metales de transición con electrones $3d$ parcialmente ocupados—así como de capturar, en términos generales, los efectos de las interacciones electrón-electrón en sólidos. Esta situación cambió en 1963, cuando Gutzwiller [7], Hubbard [4] y Kanamori [8] propusieron, de forma independiente, un modelo simple pero profundo para electrones correlacionados en una red cristalina. Conocido desde entonces como modelo de Hubbard, esta construcción se ha convertido en el paradigma teórico para el estudio de sistemas fuertemente correlacionados. En las subsecciones siguientes, presentamos su formulación general y discutimos sus distintos regímenes físicos.

### 1.1.1. Formulación del modelo

El modelo de Hubbard es el modelo de red más simple para describir electrones interactuantes en un sólido. Su Hamiltoniano contiene únicamente dos términos: uno que representa la energía cinética de los electrones al desplazarse por la red, y otro que describe la interacción local entre ellos. Se expresa como,

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{1.1}$$

donde $c^{\dagger}_{i\sigma}$ y $c_{i\sigma}$ son operadores de creación y aniquilación de un electrón con espín $\sigma$ ($\uparrow$ ó $\downarrow$) en el sitio $i$ de la red. Aquí $t$ es la amplitud de salto entre los sitios $i$ y $j$, $U$ representa la energía de repulsión de Coulomb que experimentan dos electrones con espines opuestos al ocupar el mismo sitio, y $n_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma}$ es el operador de número.

La primera suma suele restringirse a sitios vecinos $\langle i, j \rangle$, aunque también pueden incluirse términos de salto de mayor alcance. Este término favorece la deslocalización de los electrones sobre la red. En cambio, el segundo término penaliza la doble ocupación de un mismo sitio, promoviendo la localización electrónica como consecuencia de la interacción local.

La figura 1.1 ilustra de manera esquemática el modelo de Hubbard. La dinámica cuántica da lugar a fluctuaciones en la ocupación de los sitios, que pueden estar vacíos ($|0\rangle$), ocupados por un único electrón ($|\uparrow\rangle$ ó $|\downarrow\rangle$), o doblemente ocupados ($|\uparrow\downarrow\rangle$).

### 1.1.2. Regímenes de acoplamiento

A pesar de su sencillez formal —y de las simplificaciones extremas que introduce en comparación con un sólido real— el modelo de Hubbard exhibe una rica variedad de fenómenos físicos, resultado de la competencia entre la itinerancia electrónica, controlada por $t$, y las interacciones locales, controladas por $U$.

Figura 1.1.: *Ilustración esquemática del modelo de Hubbard* [9]. Los electrones, que poseen espín ($\uparrow$ ó $\downarrow$), se desplazan de un sitio de la red a otro con una amplitud de salto $t$. La dinámica cuántica da lugar a fluctuaciones en la ocupación de los sitios, tal como se indica en la secuencia inferior: un sitio de la red puede estar desocupado, ocupado por un único electrón ($\uparrow$ ó $\downarrow$), o doblemente ocupado. Cuando dos electrones ocupan un mismo sitio de la red, interactúan con energía $U$.

**Acoplamiento fuerte** $U \gg t$

En el régimen de acoplamiento fuerte ($U \gg t$) y una partícula por sitio en promedio (llenado mitad), la fuerte repulsión local impide la doble ocupación de los sitios, dificultando así la formación de un estado itinerante (metálico). Desde el punto de vista de la teoría de bandas, uno esperaría tener un metal, con un átomo por celda unidad y una banda a medio llenar. Sin embargo, para valores suficientemente grandes de $U/t$, se desarrolla un estado *aislante de Mott*, en el cual el gap entre la banda de valencia y la de conducción (o bandas de Hubbard inferior y superior, respectivamente), no tiene origen en la ruptura de simetrías espaciales ni en el orden magnético, sino que se debe puramente al bloqueo de Coulomb entre las cargas (gap de carga).

Sin embargo, es importante notar que este estado aislante de Mott posee una gran entropía de espín: se trata de un paramagneto en el que el espín del electrón localizado en cada sitio de la red puede apuntar en cualquier dirección. Esta enorme degeneración debe desvanecerse al enfriar el sistema hacia su estado fundamental, en concordancia con el teorema de Nernst. La manera en que esto ocurre depende de los detalles del modelo y de las interacciones residuales entre los grados de libertad de espín. En el caso más simple, sobre una red no frustrada (por ejemplo, bipartita), los espines se ordenan en un estado fundamental antiferromagnético. Este orden puede entenderse fácilmente en el régimen de acoplamiento fuerte mediante el mecanismo de superintercambio de Anderson: en un modelo de una sola banda, la energía de acoplamiento antiferromagnético efectivo entre espines vecinos viene dada por,

$$J_{AF} = \frac{4t^2}{U} \tag{1.2}$$

Esta expresión se deduce fácilmente mediante teoría de perturbaciones degeneradas de segundo orden en la amplitud de salto $t$, partiendo del límite de sitios desacoplados $t = 0$. En este límite, el estado fundamental de dos sitios vecinos está cuadrúplemente degenerado: los espines pueden formar un estado que es combinación de un estado singlete (antisimétrico) y/o uno de los tres estados tripletes (simétricos). Cuando se introduce una pequeña amplitud de salto $t \ll U$, esta degeneración se levanta. El estado singlete resulta energéticamente favorecido debido a la posibilidad de acceder, mediante procesos virtuales de segundo orden, a estados excitados con doble ocupación (de energía $\sim U$). En cambio, ningún estado virtual conecta con el triplete debido al principio de exclusión de Pauli. Si nos concentramos en las excitaciones de baja energía, mucho menores que la brecha hacia las excitaciones de densidad (de orden $U$ en el límite $U \gg t$), podemos considerar el espacio de Hilbert reducido formado por los estados con exactamente una partícula por sitio. En este espacio de bajas energías, el modelo de Hubbard con un electrón por sitio se reduce al modelo cuántico de Heisenberg,

$$H_J = J_{AF} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{1.3}$$

Se establece entonces una separación de escalas bien definida en el régimen de acoplamiento fuerte: para temperaturas (o energías) $T \lesssim U$, las fluctuaciones de carga se suprimen y emerge la física del aislante de Mott paramagnético, con su correspondiente enorme entropía de espín. A una escala mucho menor $T \lesssim J_{AF}$, las interacciones de espín residuales entran en juego y el sistema accede eventualmente a su verdadero estado fundamental —correspondiente, en el caso más simple, a un estado con orden antiferromagnético[1]— .

En la figura 1.2 se muestra el diagrama de fases del material $V_2O_3$ (sesquióxido de vanadio), ejemplo típico de sistema fuertemente correlacionado. El parámetro de control en este material es la presión aplicada (o la sustitución química por otros átomos en los sitios de vanadio), lo cual modifica el volumen de la celda unidad y, en consecuencia, el ancho de banda, así como otras características de la estructura electrónica, tales como el desdoblamiento por campo cristalino. Como se observa en la figura, este material exhibe las tres fases discutidas anteriormente. A baja presión y alta temperatura, se encuentra en una fase aislante de Mott paramagnética con espines fluctuantes. Al aumentar la presión, este aislante se transforma abruptamente en un metal, a través de una transición de primer orden (que termina en un punto crítico en $T_C \backsimeq 450\,\mathrm{K}$). A temperaturas bajas, $T < T_N \backsimeq 170\,\mathrm{K}$, el aislante paramagnético se ordena magnéticamente, convirtiéndose en un aislante de Mott antiferromagnético. Cabe destacar que las temperaturas características en que ocurren estas transiciones son considerablemente menores que las escalas de energía electrónicas típicas ($\sim 1\,\mathrm{eV} \backsimeq 12000\,\mathrm{K}$).

[1] Es importante señalar que este estado no es un estado de Néel clásico, con espines perfectamente alternados. De hecho, el estado de Néel ni siquiera es autoestado del Hamiltoniano cuántico de Heisenberg $H_J$, sino que el verdadero estado fundamental en redes bipartitas es un singlete global con fuertes fluctuaciones cuánticas alrededor del patrón de Néel [10].

Figura 1.2.: Diagrama de fases de $V_2O_3$ en función de la presión (o sustitción con Cr/Ti) y de la temperatura. Las ilustraciones representan de manera esquemática la naturaleza de cada fase (aislante de Mott paramagnético, metal paramagnético y aislante de Mott antiferromagnético) [11].

En la figura 1.2 se ilustran también de manera esquemática (aunque sumamente simplificada) la estructura real de cada una de las fases presentes en el diagrama. El aislante de Mott paramagnético corresponde a una superposición de configuraciones de espín esencialmente aleatorias, con aproximadamente un electrón por sitio y una presencia muy reducida de huecos o dobles ocupaciones. El aislante antiferromagnético, en cambio, exhibe orden magnético de largo alcance con patrón tipo Néel —aunque debe subrayarse que la función de onda correspondiente es un estado con fuertes fluctuaciones cuánticas, lejos de una descripción puramente clásica. Finalmente, el estado metálico resulta el más complejo visto en el espacio real, ya que involucra una superposición de configuraciones que incluyen sitios con ocupación simple, vacantes y dobles ocupaciones.

#### Acoplamiento débil $U \ll t$

Por simplicidad, consideraremos el caso de una red bipartita con una partícula por sitio en promedio. En el régimen de acoplamiento débil, la interacción $U/t$ puede tratarse mediante un desacoplamiento de Hartree-Fock, lo que permite construir una teoría de campo medio estática para la transición antiferromagnética. La ruptura de simetría entre subredes $(A,B)$ reduce la zona de Brillouin a la mitad de su volumen original, dando lugar a la formación de dos bandas:

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \pm\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_g^2/4} \tag{1.4}$$

En esta expresión, $\Delta_g$ es el ancho de la gap de Mott, que dentro de esta aproximación de Hartree-Fock se encuentra directamente relacionado con la magnetización alternante del estado fundamental, dada por

$$m_s = \langle n_{A\uparrow} - n_{A\downarrow} \rangle = \langle n_{B\downarrow} - n_{B\uparrow} \rangle \,,$$

mediante la relación:

$$\Delta_g = U m_s \tag{1.5}$$

Esto conduce a una ecuación auto-consistente para el gap (o la magnetización alternante),

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathrm{RBZ}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_g^2/4}}, \tag{1.6}$$

donde la suma se restringe a la zona de Brillouin reducida (RBZ).

En este régimen, donde la aproximación de Hartree–Fock constituye un punto de partida razonable, la inestabilidad antiferromagnética se manifiesta para valores arbitrariamente pequeños de $U/t$, y tanto el gap, como la magnetización alternante y la temperatura de Néel resultan exponencialmente pequeñas. El antiferromagnetismo adopta aquí la forma de una onda de densidad de espín con vector de orden $Q = (\pi, \ldots, \pi)$, y una modulación muy débil del parámetro de orden.

Es importante notar que esta teoría de campo medio basada en una onda de densidad de espín proporciona una descripción de bandas del estado aislante, conocida como el mecanismo de Slater: debido a la ruptura de la simetría traslacional en el estado fundamental antiferromagnético, la zona de Brillouin se reduce a la mitad y el estado fundamental consiste en llenar completamente la banda de menor energía obtenida a nivel de Hartree-Fock. Esto ocurre porque en el régimen de acoplamiento débil no existe una separación clara de escalas energéticas: los grados de libertad de carga y de espín se congelan simultáneamente.

La existencia de esta descripción tipo banda en el régimen de acoplamiento débil suele ser fuente de confusión, ya que puede llevar a pasar por alto que la física de Mott es, en esencia, un fenómeno de carga —algo que resulta evidente en el régimen de acoplamiento fuerte—.

#### Acoplamiento intermedio $U \sim D$

Este régimen, que se presenta cuando la energía de interacción $U$ es comparable con el semiancho de banda $D \propto t$, es el más interesante desde el punto de vista físico, y al mismo tiempo el más difícil de tratar teóricamente. En él coexisten la itinerancia promovida por $t$ y la tendencia a la localización inducida por $U$, dando lugar a una competencia entre distintas inestabilidades y posibles ordenamientos, muchas veces separados por pequeñas diferencias de energía.

En particular, para redes bipartitas, la imagen de Slater colapsa: el aislamiento ya no puede atribuirse únicamente a la aparición de orden magnético de largo alcance, sino que involucra mecanismos más sutiles vinculados a la reorganización del espectro electrónico impulsada por las correlaciones. En este régimen intermedio, comienzan a manifestarse señales de una separación de escalas entre los distintos grados de libertad —en especial entre los de carga y espín— que puede hacerse evidente al analizar el sistema en función de la temperatura: a escalas energéticas elevadas dominan las fluctuaciones de carga, mientras que a temperaturas más bajas emergen las correlaciones de espín.

En consecuencia, la física de este régimen no puede describirse mediante aproximaciones perturbativas simples, ni desde el límite de electrones libres ($U \to 0$), ni desde el límite atómico ($t \to 0$). Tampoco resulta adecuada una descripción basada en teorías de campo medio estáticas, incapaces de capturar la dinámica de las correlaciones y la jerarquía de escalas que caracteriza a este régimen. Es en este contexto que el desarrollo de técnicas cuantitativas no perturbativas se vuelve esencial.

Entre estas herramientas, la teoría de campo medio dinámico (*Dynamical Mean-Field Theory,* DMFT) se ha consolidado como una de las aproximaciones más exitosas: al incorporar de forma no perturbativa los efectos locales de la interacción, y mantener explícita la dependencia temporal (o frecuencial) de los correladores, DMFT permite capturar —al menos parcialmente— los fenómenos característicos del régimen de acoplamiento intermedio. Su formulación e implementación serán desarrolladas en el capítulo siguiente.

### 1.1.3. Más allá del llenado mitad: Efectos del dopado

Al alejarnos de la condición de llenado mitad, donde la física está dominada por el aislamiento de Mott y, en redes bipartitas no frustradas, por el orden antiferromagnético de tipo Néel, el modelo de Hubbard revela una fenomenología notablemente más rica. El dopaje introduce nuevos grados de libertad que desestabilizan las fases del sistema a llenado mitad, y dan lugar a una competencia sutil entre itinerancia electrónica, correlaciones de espín y reconstrucción espectral. Surgen así estados metálicos fuertemente correlacionados [12], fases con pseudogap [13], ordenamientos espaciales inhomogéneos como franjas de carga y espín [14, 15], y superconductividad no convencional de simetría $d$-wave [16, 17].

En el régimen de acoplamiento fuerte $U \gg t$, y fuera del llenado mitad, el modelo de Hubbard se reduce al modelo $t$-$J$, que es una extensión natural del modelo de Heisenberg en el subespacio de Hilbert sin doble ocupaciones. Al dopar con huecos, el movimiento de estos en el fondo antiferromagnético perturba el orden de Néel, generando estelas de frustración magnética que rompen las correlaciones óptimas y aumentan la energía asociada al término de superintercambio $J = 4t^2/U$. Para minimizar este costo energético, el sistema restringe el movimiento de los huecos

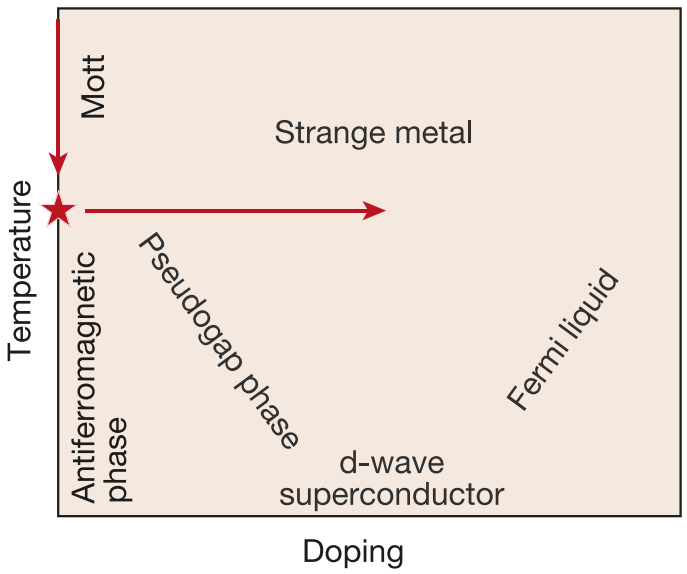


Figura 1.3.: Diagrama de fases esquemático del modelo de Hubbard dopado a temperatura finita, según los resultados experimentales y numéricos presentados en Mazurenko et al. [18]. La figura ilustra las principales fases emergentes al alejarse del llenado mitad en el régimen de acoplamiento intermedio ($U/t \sim 6-8$). Las flechas rojas indican trayectorias experimentales exploradas mediante átomos fríos en redes ópticas.

a zonas acotadas, concentrando la frustración en regiones localizadas. En el caso bidimensional, White y Scalapino [15] han encontrado que los huecos tienden a agruparse formando estructuras cuasi-unidimensionales conocidas como franjas de carga y espín (stripes). Estas franjas separan dominios con orden antiferromagnético local y presentan un desfase de $\pi$ en la alineación de espines a ambos lados, lo que permite conservar la coherencia magnética minimizando al mismo tiempo la frustración introducida por los portadores. Esta reorganización constituye un mecanismo eficaz de compromiso entre itinerancia y orden magnético, característico del régimen fuertemente correlacionado.

Además de la reorganización espacial en franjas de carga y espín, que permite aliviar la frustración magnética local inducida por el dopaje, el modelo de Hubbard en el régimen de acoplamiento fuerte exhibe otro fenómeno emergente de gran relevancia: la aparición de una interacción atractiva efectiva entre huecos, mediada por las fluctuaciones antiferromagnéticas de corto alcance entre sitios vecinos [19]. Aunque la interacción fundamental $U$ es estrictamente repulsiva, el entorno magnético subyacente —con espines localmente antialineados— puede facilitar el movimiento correlacionado de pares de huecos, ya que este perturba menos el fondo magnético que el movimiento individual.

Este mecanismo da lugar a una atracción efectiva en lo que se denomina el *canal d-wave* [16][2],

[2]Se denomina *canal d-wave* al modo de apareamiento en el cual la función de onda del par de portadores cambia de signo al rotar 90°. En una red cuadrada, esta simetría —denotada $d_{x^2-y^2}$— implica que la amplitud de apareamiento es positiva entre sitios vecinos en la dirección $x$, y negativa en la dirección $y$. Esta estructura permite evitar la repulsión de corto alcance, maximizando la energía de enlace efectiva en presencia de

que favorece el apareamiento de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$ y sienta las bases para el surgimiento de superconductividad no convencional en el sistema dopado [20]. En este escenario, el orden de pares emerge de forma coherente a partir de la física de correlaciones magnéticas, sin necesidad de recurrir a mecanismos bosónicos externos como el acoplamiento electrón-fonón.

La coexistencia entre franjas y superconductividad ha sido objeto de un debate activo en la literatura reciente. Mientras que algunos métodos numéricos —como DMRG o enfoques variacionales en redes finitas— encuentran que el estado fundamental del modelo $t$-$J$ dopado exhibe modulación espacial, otros enfoques —como DMFT de clústeres— favorecen la estabilización de un orden superconductivo uniforme. Esta aparente contradicción sugiere que ambas fases están muy próximas en energía, y que factores como el entorno, el dopaje, o el acoplamiento interplano podrían definir la fase dominante [21–23].

A medida que se reduce la relación $U/t$ hacia valores intermedios ($U/t \sim 6-8$), la física del modelo de Hubbard dopado cambia de manera cualitativa. Las franjas tienden a debilitarse y emerge una nueva fase metálica no coherente, en la que persisten las correlaciones antiferromagnéticas de corto alcance sin orden de largo alcance [13, 18]. Esta fase, conocida como *fase pseudogap*, se caracteriza por una supresión parcial de la densidad de estados en el entorno del nivel de Fermi, sin apertura completa de un gap espectral. Desde el punto de vista espectral, el pseudogap se manifiesta mediante una fuerte anisotropía en la dispersión de las excitaciones, con una pérdida de peso espectral concentrada en los antinodos del espacio recíproco[3], lo cual fragmenta la superficie de Fermi en arcos.

Esta estructura emerge como consecuencia de las correlaciones magnéticas locales, que permanecen activas incluso en ausencia de orden de Néel, y es claramente distinta de un líquido de Fermi convencional. Diversos estudios, tanto numéricos como experimentales [13, 18], indican que esta fase precede y compite con el estado superconductor de simetría $d$-wave: la apertura del pseudogap impide la formación de pares coherentes en ciertas regiones del espacio de momentos, y el orden superconductor sólo se estabiliza cuando las fluctuaciones magnéticas comienzan a debilitarse.

La figura 1.3, extraída del artículo de Mazurenko et al. [18], muestra de manera esquemática las fases discutidas en este régimen parámetros. En la región de altas temperaturas, el sistema exhibe un comportamiento incoherente característico de un *metal extraño*, donde la resistividad y otras propiedades violan las predicciones del modelo de líquido de Fermi. Al descender la temperatura, distintas fases emergen de forma secuencial según el nivel de dopaje: en las cercanías de $n = 1$, predomina el orden antiferromagnético de tipo Néel; a dopajes moderados, aparece una fase pseudogap, caracterizada por una supresión parcial de la densidad de estados en el entorno del nivel de Fermi; y en una región intermedia se estabiliza un estado superconductor

correlaciones antiferromagnéticas.

[3] $\vec{k} = (\pi, 0), (0, \pi)$ en el Hubbard bidimensional. Estos puntos son claves para el apareamiento $d$-wave.

de simetría $d$-wave, con forma de domo. Finalmente, a dopajes elevados y bajas temperaturas, el sistema evoluciona hacia un líquido de Fermi convencional. Este panorama fenomenológico no sólo emerge en estudios teóricos y simulaciones numéricas, sino que ha comenzado a ser reproducido experimentalmente mediante simulaciones cuánticas con átomos fríos en redes ópticas, como demuestra el trabajo de Mazurenko et al [18].

A valores más pequeños de la interacción —particularmente para $U/t \lesssim 4$—, el modelo de Hubbard dopado se aproxima al régimen de acoplamiento débil, en el que la itinerancia de los portadores domina sobre las correlaciones electrónicas. En este caso, el estado metálico que emerge al dopar el sistema presenta las propiedades características de un líquido de Fermi convencional: la densidad de estados en el nivel de Fermi es finita, las excitaciones de cuasipartículas están bien definidas, y la superficie de Fermi permanece cerrada y coherente [12].

Este régimen puede capturarse con buena precisión mediante teorías de perturbación en el parámetro $U$, y constituye el punto de partida natural para aproximaciones tipo RPA (*Random Phase Approximation*) o diagramáticas. En particular, estudios basados en la aproximación *fluctuation-exchange* (FLEX) [24] han mostrado que en este régimen el sistema presenta un comportamiento coherente a temperaturas bajas, en el cual tanto las correlaciones magnéticas como las superconductoras pueden tratarse de manera autocoherente.

Esta superconductividad de origen puramente electrónico surge con un domo de temperatura crítica $T_c$ que alcanza valores realistas cuando el sistema se aleja del llenado mitad. Por otro lado, al acercarse nuevamente a esta condición, las fluctuaciones magnéticas se intensifican y el sistema comienza a desviarse del comportamiento de líquido de Fermi, anticipando la aparición del pseudogap y otras fases fuertemente correlacionadas.

En resumen, el modelo de Hubbard dopado exhibe una rica variedad de fases cuya naturaleza depende de manera crítica del régimen de acoplamiento, y en las cuales las correlaciones magnéticas juegan un rol cada vez más relevante a medida que el sistema se aproxima al llenado mitad. Estas correlaciones —ya sean tratadas en esquemas perturbativos o no perturbativos— median tanto la aparición de superconductividad no convencional como la ruptura progresiva de la coherencia electrónica. De este modo, el modelo revela una continuidad física entre los distintos regímenes: desde el líquido de Fermi débilmente correlacionado hasta el pseudogap, las franjas y la superconductividad en el régimen fuertemente correlacionado. Esta complejidad hace del modelo de Hubbard una plataforma privilegiada para explorar cómo la competencia entre itinerancia, interacción y orden magnético puede dar lugar a fenómenos emergentes, muchos de los cuales guardan estrecha analogía con lo observado experimentalmente en cupratos y materiales fuertemente correlacionados.

## 1.2. El modelo de la impureza de Anderson

Un aspecto central en la teoría de campo medio dinámico (DMFT) es el mapeo del modelo de red a un modelo de impureza efectivo. Un paso fundamental para comprender los efectos de la interacción a nivel local es el análisis del modelo de la impureza de Anderson.

Este modelo fue originalmente propuesto para describir la formación de momentos magnéticos localizados en metales no magnéticos [25]. Su Hamiltoniano está dado por,

$$\mathcal{H}_{\mathrm{AIM}} = \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U\, n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma}\, c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left( V_{k\sigma}\, c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \mathrm{h.c.} \right). \tag{1.7}$$

Los primeros dos términos describen una impureza magnética: los operadores $d_{\sigma}^{\dagger}$ y $d_{\sigma}$ crean y aniquilan un electrón con espín $\sigma$ en un nivel con energía $\varepsilon_d$, cuya doble ocupación está penalizada por una repulsión local $U$. El tercer término representa un baño de electrones no correlacionados con dispersión $\varepsilon_{k\sigma}$. Finalmente, el último término describe la hibridización entre la impureza y el baño a través de los elementos de matriz $V_{k\sigma}$, que controlan la amplitud de transferencia de un electrón entre ambos subsistemas.

Este modelo captura de forma efectiva la competencia entre la localización electrónica, favorecida por la interacción $U$, y la deslocalización, inducida por el entorno itinerante. Para comprender su comportamiento físico es útil analizar sus límites característicos y las escalas de energía que de ellos emergen.

Las correlaciones electrónicas inducidas por la interacción $U$ se incorporan a través de una auto-energía local $\Sigma_{\sigma}(z)$ en la función de Green de la impureza,

$$G_{d\sigma}(z) = \frac{1}{z - \varepsilon_d - \Sigma_{\sigma}(z) - \Delta_{\sigma}(z)},$$

donde $\Delta_{\sigma}(z)$ es la función de hibridización, definida como,

$$\Delta_{\sigma}(z) = \sum_{k\sigma} \frac{V_{k\sigma}^2}{z - \varepsilon_{k\sigma}}.$$

Esta función contiene toda la información sobre el acoplamiento entre la impureza y el entorno de electrones de conducción. Su parte real produce un corrimiento efectivo del nivel de energía, mientras que su parte imaginaria determina el ancho espectral del nivel discreto debido a los procesos de salto entre la impureza y el baño,

$$\Gamma(\omega) = -\mathrm{Im}\, \Delta(\omega + i0^{+}) = \pi \sum_{k} |V_k|^2\, \delta(\omega - \varepsilon_k).$$

En muchas aplicaciones se considera la aproximación de ancho constante en una vecindad del

nivel de Fermi, $\Gamma(\omega) \approx \Gamma(\omega = 0) \equiv \Gamma$, donde,

$$\Gamma = \pi\rho(0)V^2,$$

en donde $\rho(\omega)$ es la densidad de estados no interactuante, y $V^2$ es el valor medio de $|V_k|^2$. Bajo esta aproximación, la densidad de estados local en el límite no interactuante ($U = 0$) adopta la forma de un pico Lorentziano centrado en $\varepsilon_d$ con ancho $\Gamma$,

$$\rho_d(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2}.$$

Este perfil espectral refleja que, en ausencia de interacción, el electrón en el nivel de impureza puede hibridizar libremente con el entorno, formando un estado de vida finita, tal como puede verse en la Figura 1.4.

Al activar la interacción $U$, el espectro se reorganiza de forma no trivial. En el régimen de interacción fuerte, el nivel local puede albergar sólo un electrón la mayor parte del tiempo, lo que da lugar a la formación de un momento magnético localizado. Este momento se manifiesta mediante la aparición de tres estructuras en el espectro: dos picos centrados en $\varepsilon_d$ y $\varepsilon_d + U$ —las llamadas bandas de Hubbard inferior y superior— y una resonancia central cercana al nivel de Fermi bajo ciertas condiciones (resonancia de Kondo).

Particularmente interesante es el llamado régimen de Kondo, que emerge cuando el nivel está ocupado por un solo electrón en promedio ($\langle n_d \rangle \approx 1$), y la interacción $U \gg \Gamma$ de manera que las fluctuaciones de carga quedan fuertemente suprimidas. En este caso, el espín de la impureza permanece libre y puede entrelazarse cuánticamente con los electrones del baño. A través de procesos virtuales de segundo orden en la hibridización $V$, se genera un acoplamiento antiferromagnético efectivo entre el espín de la impureza y los espines de conducción. La magnitud de este acoplamiento se hace evidente al proyectar el modelo de Anderson a un modelo de efectivo de espines via una transformación de Schrieffer-Wolff[4],

$$J = \frac{2V^2}{U} \left( \frac{1}{|\varepsilon_d|} + \frac{1}{\varepsilon_d + U} \right) \tag{1.8}$$

Este acoplamiento promueve el apantallamiento del momento magnético local por parte de los electrones itinerantes del baño a bajas temperaturas, dando lugar a un estado fuertemente correlacionado de muchos cuerpos: el singlete de Kondo.

Específicamente, por debajo de una escala de energía característica, la temperatura de Kondo $T_K$, el espín de la impureza queda dinámicamente apantallado por una nube de electrones del entorno, con la que forma un estado singlete coherente y fuertemente entrelazado. Este

[4]Esta transformación elimina los estados con doble ocupación o vacancia del nivel localizado y da lugar a un modelo efectivo de espines: el modelo de Kondo.

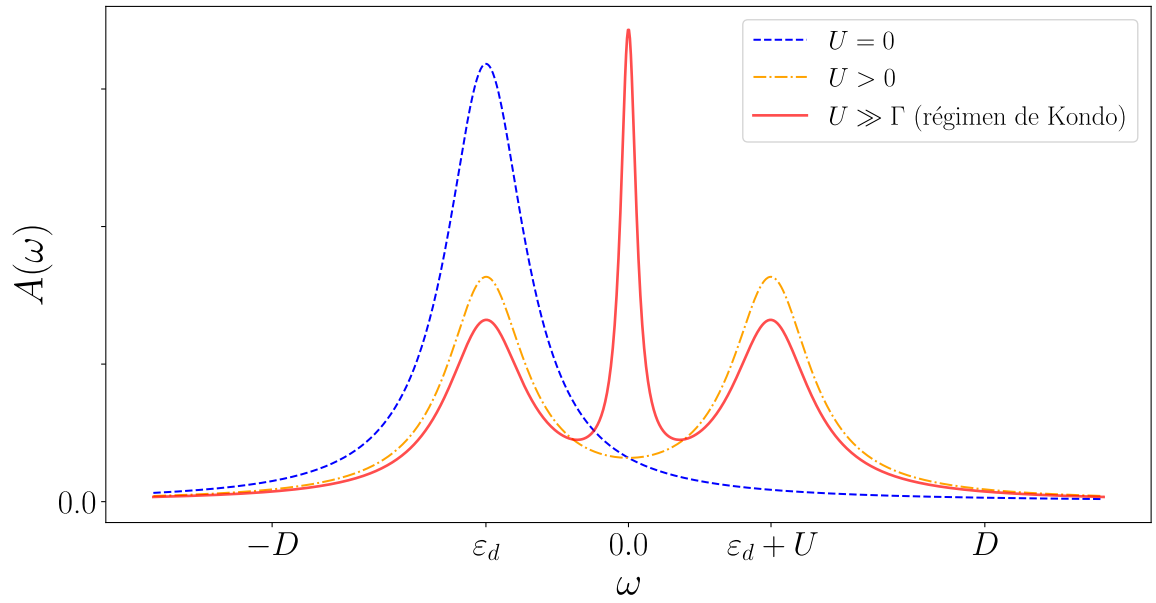


Figura 1.4.: Densidad espectral $A(\omega)$ del modelo de la impureza de Anderson en tres regímenes característicos: $U = 0$ (línea azul), $U > 0$ moderado (línea naranja), y $U \gg \Gamma$ (línea roja), correspondiente al régimen de Kondo.

fenómeno se manifiesta espectralmente mediante una resonancia muy estrecha en el nivel de Fermi, conocida como resonancia de Abrikosov–Suhl, cuyo ancho es proporcional a $T_K$. La expresión aproximada de esta escala es,

$$T_K \sim D \exp\left(-\frac{\pi\,|\varepsilon_d|\,(\varepsilon_d + U)}{2\Gamma U}\right), \tag{1.9}$$

donde $D$ es el semiancho de la banda de conducción. Esta resonancia indica la formación de cuasipartículas coherentes y marca la transición entre un régimen localmente degenerado y uno colectivamente entrelazado. Por encima de $T_K$, el espín de la impureza se comporta como un momento libre, con una susceptibilidad tipo Curie; por debajo de esa temperatura, el sistema se comporta como un líquido de Fermi fuertemente renormalizado, con una función espectral dominada por la resonancia de Kondo y picos laterales remanentes $\varepsilon_d$ y $\varepsilon_d + U$.

# 2. Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT)

La Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) es una de las herramientas más importantes para estudiar sistemas con electrones fuertemente correlacionados. La misma puede entenderse como una extensión cuántica y dinámica del concepto clásico de campo medio: su idea central consiste en mapear un modelo de red —como el modelo de Hubbard— a un problema de impureza cuántica interactuante acoplada a un baño electrónico efectivo, determinado de manera autoconsistente. A diferencia de los esquemas de campo medio estáticos (Hartree-Fock, Weiss), la DMFT conserva explícitamente las fluctuaciones cuánticas locales en el tiempo, describiendo adecuadamente los procesos de excitación y relajación en un sitio fuertemente correlacionado. La condición de autoconsistencia garantiza que el medio efectivo del sitio reproduzca las propiedades colectivas de la red completa. Este enfoque se vuelve exacto en el límite de dimensión espacial infinita $d \to \infty$, o más apropiadamente, cuando el número de coordinación $z$ tiende a infinito.

## 2.1. El concepto de campo medio

En la teoría estadística de sistemas clásicos y cuánticos, una descripción aproximada pero global de las propiedades de un modelo puede obtenerse frecuentemente mediante una teoría de campo medio. Mientras que en el modelo completo de muchos cuerpos cada partícula experimenta un campo intrincado y fluctuante generado por el resto de los grados de libertad, en una teoría de campo medio clásica este campo se reemplaza por un valor promedio efectivo ("campo medio"). En general —aunque no siempre— el problema interactuante de muchas partículas puede reducirse a un problema efectivo de partícula única embebida en un campo medio autoconsistente.

### 2.1.1. Campo medio de Weiss para el modelo de Ising

La ilustración más simple de esta idea es su aplicación al modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \tag{2.1}$$

que también puede escribirse como,

$$\mathcal{H} = \sum_i h_i S_i, \tag{2.2}$$

donde cada espín $S_i$ interactúa con un campo local,

$$h_i = -\sum_{j\in\langle i\rangle} J_{ij} S_j, \tag{2.3}$$

generado por los espines en sitios vecinos. El subíndice $\langle i\rangle$ indica que la suma es sobre los primeros vecinos del sitio $i$.

Concentrémonos en el valor medio térmico de la magnetización en cada sitio de la red, $m_i = \langle S_i\rangle$. La teoría de campo medio de Weiss propone considerar un problema equivalente de espines independientes,

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\sum_i h_i^{\text{eff}} S_i, \tag{2.4}$$

en el que el campo efectivo se toma de forma tal que el valor de $m_i$ coincida con el del modelo interactuante buscado. Esto requiere que,

$$\beta h_i^{\text{eff}} = \tanh^{-1}(m_i). \tag{2.5}$$

Supongamos que el sistema es un ferromagneto con acoplamiento entre primeros vecinos $J_{ij} = J > 0$. La aproximación de campo medio (propuesta por primera vez por Pierre Weiss, bajo el nombre de «Teoría del campo molecular») se hace explícita al aproximar $h_i^{\text{eff}}$ por el promedio térmico del campo local que percibe el espín en el sitio $i$:

$$h_i^{\text{eff}} \simeq \sum_j J_{ij} m_j = zJm, \tag{2.6}$$

donde $z$ es el número de coordinación de la red, y donde se ha usado la invarianza traslacional de la misma ($J_{ij} = J$ entre primeros vecinos, y $m_i = m$). Esto conduce a una ecuación autoconsistente para la magnetización,

$$m = \tanh(\beta z J m). \tag{2.7}$$

Es importante entender que el reemplazo del problema de espines interactuantes por un problema de espines independientes en un baño efectivo no es una aproximación, en la medida que solo usamos este modelo equivalente con el propósito de calcular la magnetización local (que es la misma para todos los sitios). La aproximación es hecha al vincular el campo de Weiss con los grados de libertad asociados a sitios vecinos, es decir, en la condición de autoconsistencia (2.6). Esta aproximación se vuelve exacta en el límite de número de coordinación infinito. Es intuitivo que los vecinos de un dado sitio se pueden tratar globalmente como un baño externo

cuando su número se hace grande, y las fluctuaciones espaciales del campo local se tornan despreciables.

### 2.1.2. Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT)

La construcción descrita en la sección anterior puede extenderse a sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Presentamos a continuación las ideas centrales de esta generalización, para el caso particular del modelo de Hubbard,

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \tag{2.8}$$

Como se explicó en el capítulo anterior, este modelo describe una colección de átomos con un único orbital $c$ localizados en los nodos $\mathbf{R}_i$ de una red periódica. Los orbitales se superponen de sitio a sitio de modo que los electrones pueden trasladarse de un sitio a otro con amplitud de probabilidad $t_{ij}$. En el límite atómico ($t_{ij} = 0$) cada átomo presenta cuatro autoestados: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\downarrow\rangle$ con energías 0, $-\mu$, $-\mu$ y $U - 2\mu$, respectivamente.

La cantidad clave en DMFT es la función de Green local en un dado sitio de la red,

$$G^\sigma_{ii}(\tau - \tau') \equiv -\Big\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c^\dagger_{i\sigma}(\tau') \Big\rangle. \tag{2.9}$$

En la teoría de Weiss para el modelo de Ising, la magnetización local $m_i$ es la de un único espín en el sitio $i$ acoplado a un campo efectivo. De manera completamente análoga, entenderemos a la función de Green local como la correspondiente a un único átomo en el sitio $i$ acoplado a un baño electrónico efectivo. Este escenario puede describirse mediante el Hamiltoniano de un *modelo de impureza de Anderson*[1],

$$\mathcal{H}_{\text{AIM}} = \mathcal{H}_{\text{átomo}} + \mathcal{H}_{\text{baño}} + \mathcal{H}_{\text{acoplamiento}}, \tag{2.10}$$

en el que,

$$\mathcal{H}_{\text{átomo}} = U\, n^c_\uparrow n^c_\downarrow - \mu(n^c_\uparrow + n^c_\downarrow), \tag{2.11}$$

$$\mathcal{H}_{\text{baño}} = \sum_{l\sigma} \varepsilon_l\, a^\dagger_{l\sigma} a_{l\sigma}, \tag{2.12}$$

$$\mathcal{H}_{\text{acoplamiento}} = \sum_{l\sigma} \Big( V_l a^\dagger_{l\sigma} c_\sigma + V_l^* c^\dagger_\sigma a_{l\sigma} \Big). \tag{2.13}$$

[1] Estrictamente hablando, tenemos una colección de modelos de impureza independientes, uno por cada sitio de la red. En esta discusión, por simplicidad, consideramos una fase con invarianza traslacional y nos enfocamos en un único sitio de la red (por lo que podemos quitar el subíndice de sitio para el orbital de impureza $c^\dagger_\sigma$). Asumimos además una fase paramagnética. El formalismo se generaliza fácilmente para fases con orden de largo alcance (con ruptura de simetría traslacional y/o de espín [12]).

Aquí se ha introducido un conjunto de fermiones no interactuantes, descritos por los operadores $a^\dagger_{l\sigma}$, que corresponden a los grados de libertad del baño efectivo que actúan sobre el sitio $\mathbf{R}_i$. Los parámetros $\varepsilon_l$ y $V_l$ se ajustan de forma tal que la función de Green local del orbital de impureza $c_\sigma$ coincida con la función de Green local del modelo de red. Por simplicidad, consideramos una fase paramagnética con invarianza traslacional, de modo que basta con estudiar un único sitio y omitir el subíndice $i$.

Usando un formalismo de integral de camino, se pueden integrar los grados de libertad del baño y su acoplamiento para obtener una acción efectiva para el orbital de la impureza [2]:

$$S_{\text{eff}} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma \bar{c}_\sigma(\tau)\, \mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')\, c_\sigma(\tau') + U\int_0^\beta d\tau\, n^c_\uparrow(\tau) n^c_\downarrow(\tau), \tag{2.14}$$

en la cual,

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n), \tag{2.15}$$

siendo,

$$\Delta(i\omega_n) = \sum_l \frac{|V_l|^2}{i\omega_n - \varepsilon_l}, \tag{2.16}$$

la *función de hibridización* de la impureza. La acción efectiva $S_{\text{eff}}$ describe la dinámica local del sitio bajo consideración: $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')$ corresponde a la amplitud de que un electrón (proveniente del baño externo, es decir, de los otros sitios de la red) sea creado en el sitio de la impureza en el instante $\tau$, y destruido luego en el instante $\tau'$ (volviendo al baño). En el caso en que dos electrones estén presentes simultáneamente, se incluye un costo energético adicional $U$. De esta manera, la acción efectiva incorpora las fluctuaciones entre los cuatro estados atómicos $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\downarrow\rangle$ inducidas por el acoplamiento con el baño externo. Notemos entonces que podemos interpretar a $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')$ como la generalización cuántica del campo efectivo de Weiss en el caso clásico. La diferencia principal es que este campo es ahora una función del tiempo imaginario en lugar de un número. Esta característica es la que permite tener en cuenta las fluctuaciones cuánticas locales (entre los 4 estados atómicos de cada sitio), que es el principal propósito de la DMFT.

Debemos ahora generalizar al caso cuántico la aproximación de campo medio que vincula el campo de Weiss $\mathcal{G}_0^{-1}$ con la función de Green local $G_{ii}$ (que en el caso clásico es la relación de autoconsistencia (2.6)). En el modelo de impureza efectivo, definimos la autoenergía local como:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) &\equiv \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n) = \\ &= i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n).\end{aligned} \tag{2.17}$$

Consideremos, por otro lado, la autoenergía del modelo de red original, definida a partir de la

[2] En la ecuación ((2.14)) $\bar{c}_\sigma$ y $c_\sigma$ corresponden variables de Grassmann asociadas a los operadores $c^\dagger_\sigma$ y $c_\sigma$ respectivamente.

| **Campo medio dinámico** | **Campo medio clásico** | |
|---|---|---|
| $\mathcal{H} = -\sum_{ij\sigma} t_{ij}\, c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \sum_i \mathcal{H}_{\text{átomo}}(i)$ | $\mathcal{H} = -\sum_{(ij)} J_{ij}\, S_i S_j$ | **Hamiltoniano** |
| $G_{ii}(i\omega_n) = -\langle c^{\dagger}_i(i\omega_n)\, c_i(i\omega_n)\rangle$ | $m_i = \langle S_i \rangle$ | **Observable local** |
| $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\text{átomo}} + \sum_{l\sigma} \varepsilon_l\, a^{\dagger}_{l\sigma} a_{l\sigma} + \sum_{l\sigma} V_l (a^{\dagger}_{l\sigma} c_{\sigma} + \text{h.c.})$ | $\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\, h_{\text{eff}}\, S$ | **Hamiltoniano efectivo** |
| $\Delta(i\omega_n) = \sum_l \dfrac{\lvert V_l\rvert^2}{i\omega_n - \varepsilon_l}$, $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta(i\omega_n)$ | $h_{\text{eff}}$ | **Función/Campo de Weiss** |
| $\Delta(i\omega_n) \simeq i\omega_n + \mu - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n)$ | $h_i^{\text{eff}} \simeq \sum_j J_{ij}\, m_j = zJm$ | **Autoconsistencia** |

Tabla 2.1.: Correspondencia entre la teoría de campo medio de un sistema clásico y la teoría de campo medio dinámica de un sistema cuántico.

función de Green completa $G_{ij}(\tau - \tau') \equiv -\left\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c^{\dagger}_{j\sigma}(\tau') \right\rangle$, que en el espacio de momentos está dada por,

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \tag{2.18}$$

en donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la transformada de Fourier de la integral de salto ($t_{ij}$), es decir, la relación de dispersión de la banda no interactuante:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \equiv \sum_j t_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \tag{2.19}$$

Hacemos entonces la aproximación de que la autoenergía de la red coincide con la autoenergía de la impureza. En el espacio real, esto supone despreciar todas las componentes no locales de la autoenergía $\Sigma_{ij}$ y aproximar la componente local por $\Sigma_{imp}$,

$$\Sigma_{ii} \simeq \Sigma_{\text{imp}}\ ,\ \Sigma_{i\neq j} \simeq 0. \tag{2.20}$$

Reemplazando en (2.17) esto implica que,

$$\Delta(i\omega_n) \simeq i\omega_n + \mu - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n), \tag{2.21}$$

en donde, por construcción, $G$ es la función de Green local del modelo de red,

$$G(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \Sigma_{\text{imp}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \tag{2.22}$$

De esta manera la condición de autoconsistencia (2.21) queda escrita como una prescripción sobre $\Delta(i\omega_n)$.

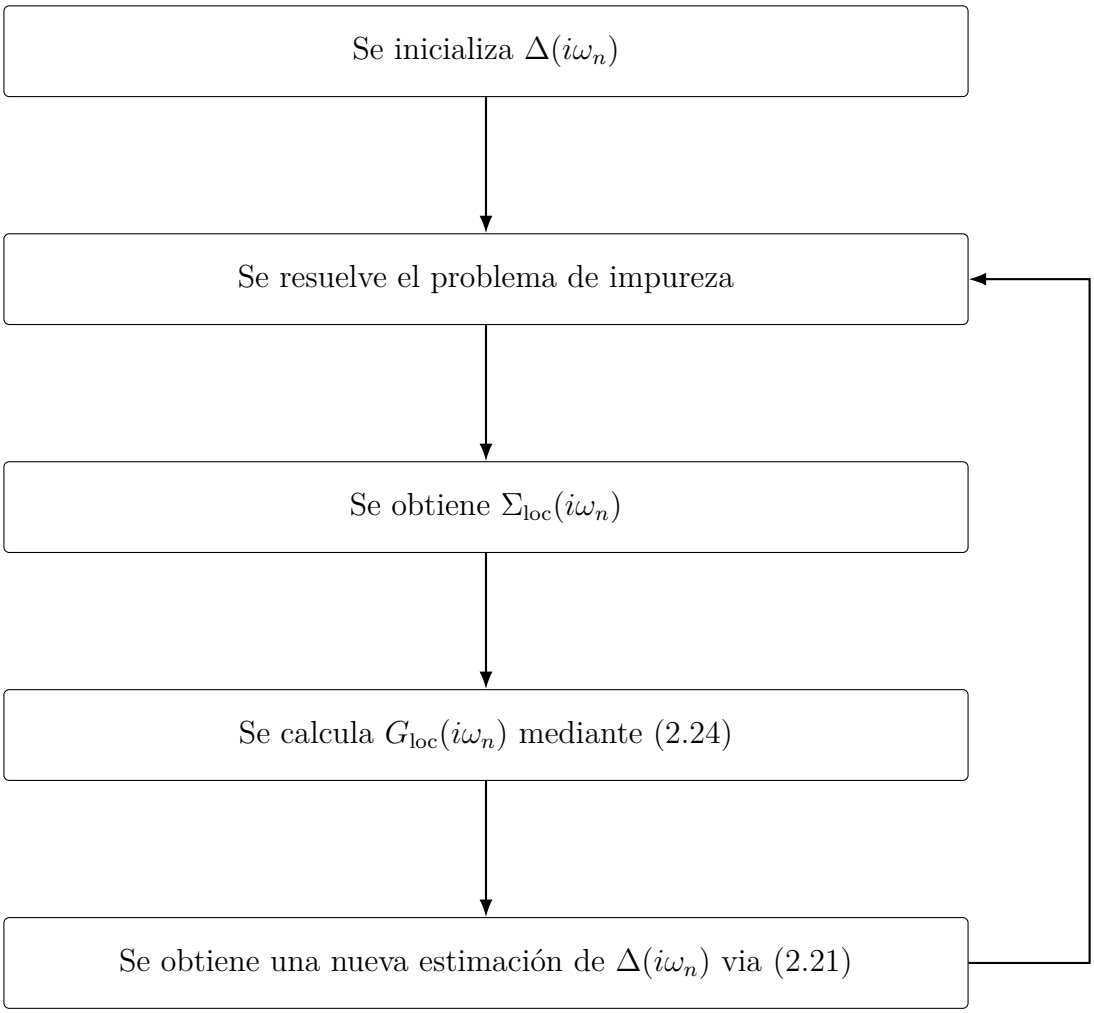


Figura 2.1.: Solución auto-consistente de las ecuaciones de DMFT.

Definiendo la densidad de estados no interactuante,

$$\rho(\varepsilon) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \tag{2.23}$$

podemos escribir,

$$G(i\omega_n) = \int d\varepsilon \, \frac{\rho(\varepsilon)}{\zeta - \varepsilon} \equiv \tilde{D}(\zeta), \tag{2.24}$$

con $\zeta = i\omega_n + \mu - \Sigma_{\rm imp}$, y en donde, se ha introducido la transformada de Hilbert $\tilde{D}(\zeta)$. De esta forma, la información sobre la estructura de la red entra únicamente a través de $\rho(\varepsilon)$ en las ecuaciones de campo medio.

La condición de autoconsistencia (2.21) relaciona para cada frecuencia, el campo medio dinámico representado por $\Delta(i\omega_n)$ con la función de Green local $G(i\omega_n)$. Las ecuaciones (2.21) y (2.24) nos permiten determinar, en principio, ambas funciones $\Delta$ y $G$, o equivalentemente, $\mathcal{G}_0$ y $G$. En la práctica, se resuelven mediante un procedimiento iterativo (esquematizado en la Fig.2.1). Generalmente, este procedimiento converge a una única solución independientemente

de la elección inicial de $\Delta(i\omega_n)$. Sin embargo, en ciertas situaciones —por ejemplo, cerca de la transición de Mott— pueden existir soluciones múltiples y metaestables. La analogía entre la construcción clásica de campo medio y su contraparte cuántica (dinámica) se resume en la Tabla 2.1.

## 2.2. Límites en que DMFT es exacto

### 2.2.1. Dos límites simples: el límite atómico y el límite de no interacciones

Resulta instructivo observar que las ecuaciones de DMFT se vuelven exactas en dos límites simples: en el *límite de no interacciones* ($U = 0$) y en el *límite atómico* ($t_{ij} = 0$).

- **Límite de no interacciones ($U = 0$):** En este caso, la ecuación (2.14) conduce a $G(i\omega_n) = \mathcal{G}_0(i\omega_n)$, de modo que $\Sigma_{\text{imp}} = 0$. Luego,

$$G(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

  que corresponde a la función de Green libre. DMFT se vuelve exacto, pues la autoenergía no solo es independiente de $\mathbf{k}$ (local), sino que es nula.

- **Límite atómico ($t_{ij} = 0$):** Aquí la red se descompone en una colección de sitios independientes, con $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. De las ecuaciones de DMFT se sigue que $\Delta(i\omega_n) = 0$, como es de esperarse, y que $\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu$. La acción efectiva $S_{\text{eff}}$ describe entonces la dinámica puramente local del Hamiltoniano atómico $\mathcal{H}_{\text{átomo}}$, con:

$$G_{\text{átomo}}(i\omega_n) = \frac{1 - n/2}{i\omega_n + \mu} + \frac{n/2}{i\omega_n + \mu - U}, \tag{2.25}$$

$$\Sigma_{\text{átomo}}(i\omega_n) = \frac{nU}{2} + \frac{\frac{n}{2}(1 - n/2)U^2}{i\omega_n + \mu - (1 - n/2)U}, \tag{2.26}$$

  siendo, $n/2 = (e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu - U)})/(1 + 2e^{\beta\mu} + e^{\beta(2\mu - U)})$.

Vemos entonces que la DMFT describe de manera exacta estos dos límites, proporcionando una interpolación controlada entre ambos. Esta capacidad de describir el régimen de acoplamiento intermedio es una de las razones fundamentales de su éxito.

### 2.2.2. Límite de número de coordinación infinito

Al igual que en el caso clásico, la DMFT se vuelve exacta cuando el número de coordinación $z$ tiende a infinito. En este límite, la autoenergía de la red es estrictamente local y la

aproximación (2.20) se convierte en igualdad: $\Sigma_{i\neq j} = 0$ y $\Sigma_{\text{loc}} = \Sigma_{\text{imp}}$ [26, 27].

En el modelo de Ising clásico, el acoplamiento entre primeros vecinos debe escalarse como $J_{ij} = J/z$ para que el campo de Weiss $h_{\text{eff}}$ en (2.6) permanezca de orden uno [9], preservando así la competencia energética que es esencial en la física del ordenamiento magnético.

En el caso cuántico del modelo de Hubbard, el mismo principio exige escalar la amplitud de salto como,

$$t_{ij} = \frac{t}{\sqrt{z}}, \tag{2.27}$$

lo que garantiza un equilibrio finito entre energía cinética e interacción en el límite $z \to \infty$. Este escalamiento implica que la densidad de estados no interactuante $\rho(\varepsilon)$ tenga un límite bien definido, y que el acoplamiento de superintercambio $J_{ij} \propto t_{ij}^2/U$ escale como $1/z$, de modo que el orden magnético se preserve con temperaturas de transición del orden de la unidad [12].

En la práctica, se emplean habitualmente dos redes como prototipos en este límite: la red cúbica $d$-dimensional (o hipercúbica) y la red de Bethe.

#### Red cúbica *d*-dimensional

Comencemos analizando la red cúbica $d$-dimensional con salto a primeros vecinos. Para esta red el número de coordinación es $z = 2d$, y la transformada de Fourier de la energía cinética es,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2\, t_{ij} \sum_{n=1}^{d} \cos k_n, \tag{2.28}$$

Como se mencionó antes, en el límite $d \to \infty$ se normaliza $t_{ij}$ como $t/\sqrt{2d}$. Por el teorema central del límite, considerando a los cosenos como variables aleatorias, la densidad de estados converge a una gaussiana,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{t\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{2t^2}\right), \tag{2.29}$$

cuya transformada de Hilbert es,

$$\tilde{D}(\zeta) = -i\sqrt{\pi} e^{-\zeta^2} \operatorname{erfc}(-i\zeta) \equiv -i\sqrt{\pi}\, w(\zeta), \tag{2.30}$$

en donde erfc denota a la función error complementaria, y $w(\zeta) = e^{\left(-\zeta^2\right)}\operatorname{erfc}\left(-i\zeta\right)$ a la función error complementaria escalada, también conocida como función Faddeeva. En el caso que se incluyan saltos a segundos vecinos a lo largo de las diagonales, la densidad de estados cambia, y se obtiene un interesante modelo de dimensión infinita en el que el orden magnético es frustrado [26].

La similitud entre (2.29) y la densidad correspondiente a $d = 3$, nos permiten asumir que los resultados obtenidos mediante DMFT en dimensión infinita son cualitativamente relevantes

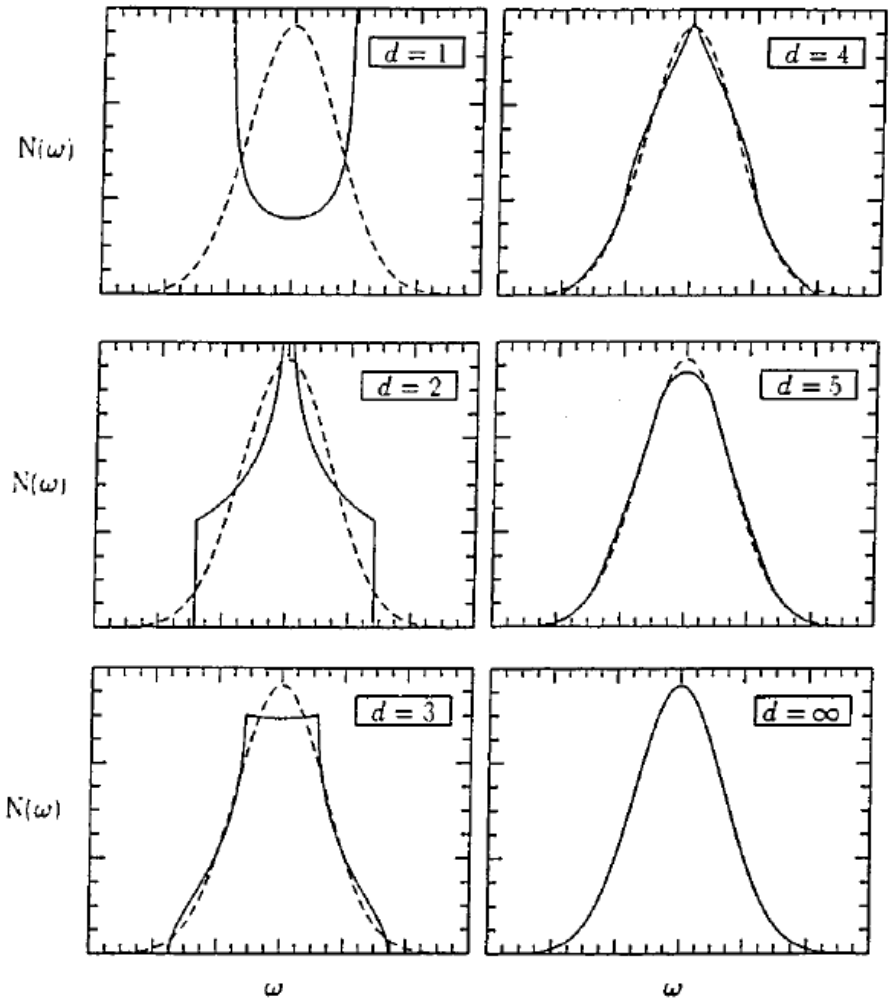


Figura 2.2.: Comparación entre densidades de estados no interactuantes $\rho(\varepsilon)$ para redes hipercúbicas de distinta dimensión [28]

para la descripción de materiales reales. En la figura 2.2 se compara la densidad de estados obtenida para distintas dimensiones con la correspondiente al límite de dimensión infinita. El principal inconveniente de utilizar (2.29) es que esta densidad de estados carece de bordes de banda, característica que sí debería estar presente en una densidad de estados realista.

### Red de Bethe

La red de Bethe (árbol de Cayley) con número de coordinación $z = 3$ es la que se muestra en la figura 2.3. Esta red es bipartita para todos los valores de $z$. El caso especial de $z = 2$ corresponde a una red unidimensional. Excepto en este caso, no existe transformada de Fourier simple para esta red, y para obtener la densidad de estados no interactúante con conectividad arbitraria conviene utilizar el método de la cavidad. La deducción de este resultado puede verse en [12]. En el límite de número de coordinación infinito se obtiene una densidad de estados

semicircular con semi-ancho de banda $2t$,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi t^2}\sqrt{4t^2 - \varepsilon^2}, \quad |\varepsilon| < 2t, \tag{2.31}$$

con transformada de Hilbert,

$$\tilde{D}(\zeta) = \frac{1}{2t^2}\left[\zeta - \sqrt{\zeta^2 - 4t^2}\right]. \tag{2.32}$$

donde la rama de la raíz se elige de modo que $\mathrm{Im}\,\tilde{D}(\zeta) > 0$ para $\mathrm{Im}\,\zeta > 0$. En este caso particular, la transformada de Hilbert satisface la siguiente relación,

$$\zeta = t^2\tilde{D}\left(\zeta\right) + \tilde{D}\left(\zeta\right)^{-1}. \tag{2.33}$$

En el marco de DMFT, la ecuación (2.24) nos indica que $G(i\omega_n) = \tilde{D}\left(\zeta\right)$, y entonces utilizando la relación (2.33), la condición de autoconsistencia para este tipo de red se reduce a,

$$\Delta(i\omega_n) = t^2 G(i\omega_n). \tag{2.34}$$

La simplicidad de esta relación, unida al hecho de que (2.31) presenta bordes de banda (con comportamiento de raíz cuadrada) similar al de una red cúbica tridimensional, hace que la red de Bethe sea el modelo de elección en numerosos cálculos de DMFT.

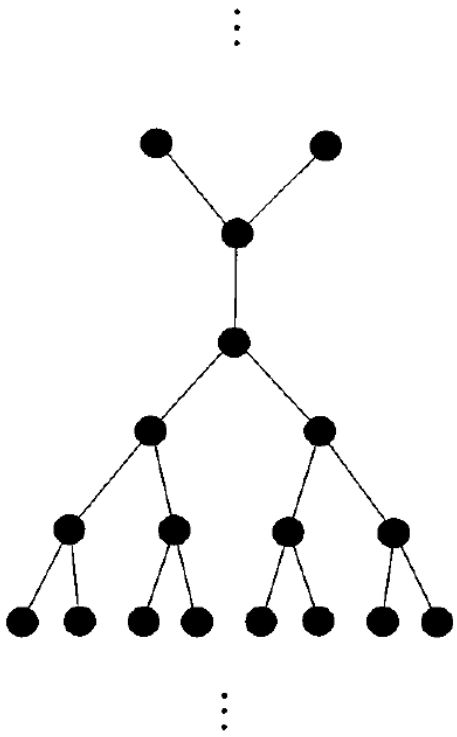

Figura 2.3.: Estructura de una red de Bethe (árbol de Cayley) con conectividad $z = 3$.

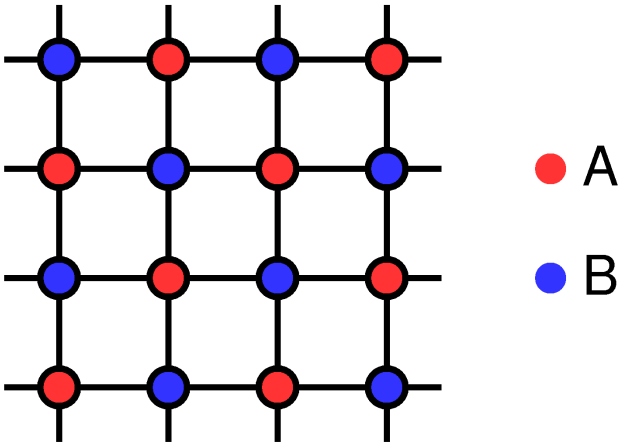


Figura 2.4.: La red cuadrada como ejemplo de red bipartita. Esta red está compuesta por dos subredes complementarias, la subred A (sitios rojos) y la subred B (sitios azules).

## 2.3. DMFT en una red bipartita

Una red bipartita es aquella cuyos sitios pueden dividirse en dos grupos, de forma tal que los sitios del grupo A son primeros vecinos de los sitios del grupo B y viceversa. Por ejemplo, una red cuadrada es una red bipartita, tal como se observa en la figura 2.4.

Por simplicidad, en la deducción de las ecuaciones de DMFT presentada en 2.1.2, se asumió una fase paramagnética con invarianza traslacional. Sin embargo, una de las herramientas centrales desarrolladas en esta tesis es la extensión de dichas ecuaciones para el caso de una red bipartita en la que las subredes $A$ y $B$ no son equivalentes, y en la que las funciones de correlación locales pueden depender explícitamente del espín [29]. Este formalismo permite describir cualquier fase con simetría de tipo tablero de ajedrez.

### 2.3.1. Caso general

Para dar cuenta de la naturaleza bipartita de la red, introducimos los operadores $a^\dagger$ y $b^\dagger$ que actúan sobre la subred $A$ y la subred $B$, respectivamente. En términos de estos operadores, el modelo de Hubbard se escribe como,

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\langle ij \rangle} \left( a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{2.35}$$

en donde se asume que el salto es solo a primeros vecinos con amplitud de probabilidad $t$. Al transformar Fourier la parte cinética se obtiene,

$$\mathcal{H}_{\text{cin}} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{2.36}$$

en donde la suma sobre $\mathbf{k}$ queda restringida a la zona de Brillouin reducida (RBZ), y $\Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} = \left(a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma},\, b^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\right)$ es el espinor compuesto por los operadores de creación de ambas subredes.

A partir de esta expresión, la función de Green completa del sistema adopta la forma matricial:

$$\begin{aligned} \mathrm{G}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) &= \begin{pmatrix} \zeta_{A\sigma} & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_{B\sigma} \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} \zeta_{B\sigma} & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_{A\sigma} \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} G^{AA}_{\mathbf{k}\sigma} & G^{AB}_{\mathbf{k}\sigma} \\ G^{BA}_{\mathbf{k}\sigma} & G^{BB}_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.37}$$

con $\zeta_{A\sigma} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{A\sigma}(i\omega_n)$ y $\zeta_{B\sigma} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{B\sigma}(i\omega_n)$. Aquí $\Sigma_{A\sigma}(i\omega_n)$ y $\Sigma_{B\sigma}(i\omega_n)$ representan las autoenergías locales de cada subred.

Para esta red los sitios no son todos equivalentes y para obtener las ecuaciones de DMFT, se deben plantear entonces dos modelos de impureza, uno para los átomos de la subred A y otro para los átomos de la subred B. Sin pérdida de generalidad, enfoquémosnos en un sitio de la subred A. En el modelo de impureza asociado a este sitio tendremos una acción efectiva,

$$S_{\text{eff}} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma \bar{a}_\sigma(\tau)\, \mathcal{G}^{-1}_{0A\sigma}(\tau - \tau')\, a_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau\, n^a_\uparrow(\tau)\, n^a_\downarrow(\tau), \tag{2.38}$$

con

$$\mathcal{G}^{-1}_{0A\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{B\sigma}(i\omega_n). \tag{2.39}$$

El subíndice $B$ en la función de hibridización refleja que, al existir solo saltos a primeros vecinos, la impureza de la subred $A$ intercambia electrones únicamente con un medio efectivo formado por la subred $B$. Por lo tanto, la conexión con el modelo de red se da mediante la siguiente relación,

$$\Delta_{B\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Sigma_{B\sigma}(i\omega_n) - \left[G^{BB}_\sigma(i\omega_n)\right]^{-1}, \tag{2.40}$$

en donde,

$$G^{BB}_\sigma(i\omega_n) = \zeta_{A\sigma} \int d\varepsilon\, \frac{\rho(\varepsilon)}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon^2}, \tag{2.41}$$

que, de acuerdo a la ecuación (2.37), corresponde a la función de Green local para un átomo de la subred $B$ (ver Apéndice A).

Repitiendo el mismo análisis para un sitio de la subred $B$ se obtienen ecuaciones análogas a las anteriores, simplemente intercambiando los índices $A$ y $B$.

En resumen, la condición de autoconsistencia de DMFT para una red bipartita puede escribirse como,

$$\mathcal{G}^{-1}_{0\alpha\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{\bar{\alpha}\sigma}(i\omega_n), \tag{2.42}$$

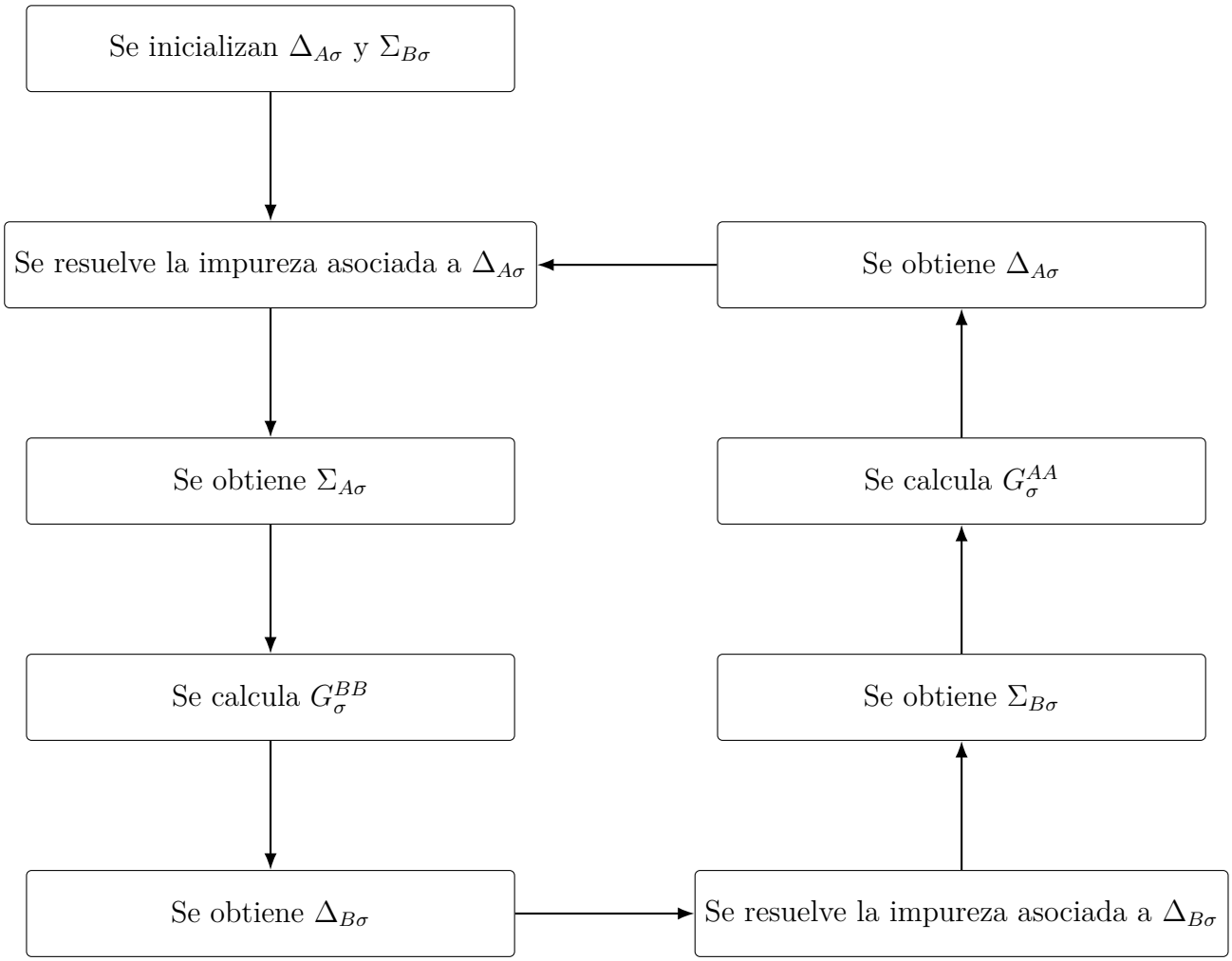


Figura 2.5.: Solución auto-consistente de las ecuaciones de DMFT para una red bipartita.

con $\alpha = A, B$ y $\bar{\alpha} = B, A$ respectivamente. La solución autoconsistente de este conjunto de ecuaciones es la que se muestra en la figura 2.5. En primer lugar, se inicializa la función de hibridización de una de las subredes, digamos $\Delta_{A\sigma}$, y la autoenergía local de la subred complementaria, $\Sigma_{B\sigma}$. Se resuelve entonces el problema de impureza cuántica asociado a $\Delta_{A\sigma}$ y se obtiene la autoenergía correspondiente $\Sigma_{A\sigma}$. Usando esta autoenergía y la propuesta inicialmente $\Sigma_{B\sigma}$, se calcula $G_\sigma^{BB}$ vía la ecuación (2.41) y se obtiene una primera estimación de $\Delta_{B\sigma}$ a través de (2.40). El proceso se repite simétricamente, actualizando iterativamente las funciones de correlación de cada subred hasta alcanzar la convergencia.

### 2.3.2. Orden antiferromagnético

El ejemplo más sencillo en el que se pueden aplicar estas ecuaciones es una red con orden antiferromagnético de largo alcance, en el que ambas subredes se magnetizan de manera opuesta. La simetría de Néel característica de esta fase introduce una simplificación en las ecuaciones de DMFT que, como veremos a continuación, en este caso particular se reducen a las

correspondientes a una única subred.

Específicamente, la simetría de Néel implica la siguiente relación entre las autoenergías:

$$\Sigma_{A\sigma} = \Sigma_{B\bar{\sigma}}, \tag{2.43}$$

con $\sigma = \uparrow, \downarrow$ y $\bar{\sigma} = \downarrow, \uparrow$, respectivamente. Esto, a su vez, implica que

$$\zeta_{A\sigma} = \zeta_{B\bar{\sigma}}, \tag{2.44}$$

por lo que resulta,

$$G^{AA}_{\sigma} = G^{BB}_{\bar{\sigma}}. \tag{2.45}$$

Por lo tanto, utilizando la misma notación que en (2.42), se sigue que en las ecuaciones de DMFT resulte,

$$\Delta_{\bar{\alpha}\sigma} = \Delta_{\alpha\bar{\sigma}}. \tag{2.46}$$

De este modo, el subíndice $\alpha$ referente a las subredes se vuelve innecesario, y el problema se reduce al de la impureza de una única subred:

$$\mathcal{G}^{-1}_{0\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{\bar{\sigma}}(i\omega_n). \tag{2.47}$$

La solución auto-consistente sigue un esquema análogo al de una red con invarianza traslacional. Basta con resolver las ecuaciones para ambas proyecciones de espín en una de las subredes, ya que la solución para la subred complementaria se obtiene directamente por simetría.

## 2.4. DMFT en sistemas con desorden

En los materiales reales, la invarianza traslacional que subyace a los modelos ideales rara vez se cumple estrictamente. Defectos estructurales, vacancias, sustituciones químicas y fluctuaciones locales en los parámetros de red introducen desorden, cuya presencia es capaz de modificar profundamente las propiedades electrónicas. En sistemas fuertemente correlacionados, el desorden no actúa de manera aditiva, sino que modifica de manera no trivial las interacciones electrónicas, dando lugar a fenómenos como la localización de Anderson [30], y la aparición de colas de Lifshitz en la densidad de estados [31][3]. Este escenario ha motivado la extensión de las ecuaciones de DMFT desarrolladas en la Sección 2.1.2, al tratamiento de sistemas de electrones interactuantes en redes aleatorias. A continuación presentamos brevemente las formulaciones más relevantes.

[3]Las colas de Lifshitz se refieren a contribuciones a la densidad de estados que decaen exponencialmente más allá de los bordes de banda del sistema limpio. Estas colas reflejan la presencia de estados localizados poco probables, pero físicamente relevantes [31].

### 2.4.1. Extensión natural al problema con desorden

En el caso más general, el modelo de Hubbard definido sobre una red desordenada adopta la forma,

$$\mathcal{H} = \sum_{ij,\sigma} \left[-t_{ij} + \varepsilon_i\, \delta_{ij}\right] c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{2.48}$$

donde la aleatoriedad puede afectar tanto a los elementos de salto $t_{ij}$ (desorden no diagonal), distribuidos según una probabilidad $P_h[t_{ij}]$, como a las energías de sitio $\varepsilon_i$ (desorden diagonal), distribuidas según $P_s[\varepsilon_i]$.

La idea básica del enfoque de campo medio consiste en enfocarse en un único sitio de la red y construir una teoría efectiva para las propiedades locales. Desde esta perspectiva, el sitio se considera embebido en un campo efectivo, denominado campo de cavidad. En presencia de desorden, la situación se complica: el campo de cavidad varía de un sitio a otro, reflejando los entornos aleatorios.

La versión local del modelo de Hubbard limpio se reduce a un único modelo de impureza de Anderson. En contraste, su extensión con desorden da lugar a una colección de modelos de impureza de Anderson, que capturan la física de los distintos entornos locales experimentados por los electrones en cada sitio de la red. La acción efectiva correspondiente a un sitio $i$ puede escribirse como,

$$\begin{aligned} S^{(i)}_{\text{eff}} = \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau'\, \bar{c}_{i\sigma}(\tau) \Big[\delta(\tau-\tau')\big(\partial_\tau + \varepsilon_i - \mu\big) + W_{i\sigma}(\tau,\tau')\Big] c_{i\sigma}(\tau') + \\ + U \int_0^{\beta} d\tau\, \bar{c}_{i\uparrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \bar{c}_{i\downarrow}(\tau) c_{i\downarrow}(\tau). \end{aligned} \tag{2.49}$$

que en el límite de número de coordinación infinito adopta la siguiente condición de auto-consitencia para la red de Bethe,

$$W_{i\sigma}(i\omega_n) = \int d\varepsilon_j\, P_s[\varepsilon_j] \int dt_{ij}\, P_h[t_{ij}]\, t_{ij}^2\, G_{j\sigma}(i\omega_n) = \overline{t_{ij}^2\, G_{j\sigma}(i\omega_n)}, \tag{2.50}$$

donde la barra superior indica el promedio aritmético sobre las distintas configuraciones de desorden, y

$$G_{j\sigma}(i\omega_n) = \Big\langle \bar{c}_{j\sigma}(i\omega_n)\, c_{j\sigma}(i\omega_n) \Big\rangle_{S^{(j)}_{\text{eff}}} \tag{2.51}$$

es la función de Green local evaluada con respecto a la acción efectiva (2.49).

Al igual que en sistemas limpios, el problema se simplifica cuando el número de vecinos es grande, en cuyo caso los campos de cavidad se vuelven auto-promediantes, es decir, independientes de las realizaciones específicas de desorden, de modo que solo sobreviven las fluctuaciones locales. La teoría adquiere entonces un carácter de campo medio dinámico: conserva las fluctuaciones temporales, pero descarta las espaciales. Como consecuencia, fenómenos esencialmente espaciales, como la localización de Anderson, permanecen ausentes en el límite estricto $d \to \infty$. No obstante,

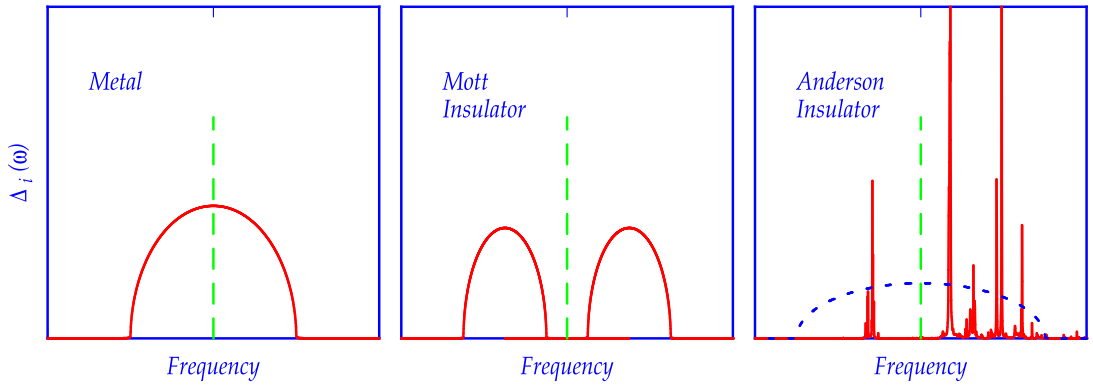


Figura 2.6.: Función de hibridización local $\Delta_i(\omega)$ como parámetro de orden para la transición metal-aislante en presencia de desorden [34]. En un metal (a) existen estados electrónicos disponibles en las cercanías del nivel de Fermi (línea verde discontinua) que permiten la deslocalización. En el aislante de Mott (b) y en el aislante de Anderson (c), el nivel de Fermi cae dentro de una brecha, impidiendo el escape electrónico desde un sitio dado. En el caso de la localización de Anderson (c), la función de hibridización típica exhibe brechas amplias y picos aislados, reflejo del solapamiento con funciones de onda localizadas circundantes. Nótese que la función espectral *promediada* (línea azul discontinua en (c)) no muestra brecha, y por lo tanto no puede emplearse como parámetro de orden para la transición de localización.

incluso en este nivel, el formalismo resulta lo suficientemente flexible como para abordar en detalle múltiples cuestiones acerca de la competencia entre correlaciones fuertes y desorden local [32, 33].

### 2.4.2. Teoría del Medio Típico (TMT)

La cantidad central en DMFT es la función de hibridización local $\Delta_i(\omega)$. Físicamente esta función representa la disponibilidad de estados a los cuales un electrón puede saltar al salir de un dado sitio de la red. De acuerdo a la regla de oro de Fermi, la tasa de escape hacia sitios vecinos es proporcional a la parte imaginaria de $\Delta(\omega)$ —implicando un comportamiento aislante siempre que $\mathrm{Im}\,\Delta_i(\omega)$ tenga un gap en el nivel de Fermi—. En el caso de una transición de Mott en ausencia de desorden, este gap es consecuencia directa de la fuerte repulsión de Coulomb local, y es idéntica para todos los sitios de la red.

La situación es más sutil en el caso de localización inducida por desorden [30]. En un aislante de Anderson, el entorno local que percibe un electrón en un sitio dado puede diferir drásticamente de su valor promedio. En este caso la función de hibridización $\Delta_i(\omega)$, exhibe fuertes fluctuaciones espaciales de un sitio a otro, y su forma típica presenta grandes gaps y picos aislados, que reflejan el solapamiento con funciones de onda localizadas en sitios circundantes, tal como se muestra en la figura 6(c). La nulidad de la parte imaginaria de $\Delta_i(\omega)$ en el nivel

de Fermi indica el comportamiento aislante del sistema. Sin embargo, al promediar sobre todo el sólido estos gaps se diluyen ocultando la verdadera localización. La discrepancia entre los valores típicos y promedios de $\Delta_i(\omega)$ persiste incluso en el régimen metálico, donde $\Delta_{\text{typ}}$ puede ser mucho menor que el promedio $\overline{\Delta(\omega)}$ [33].

Para abordar este punto se han propuesto dos rutas alternativas. La solución ideal consiste en rastrear la hibridización local —o tasa de escape— de cada sitio de la red, camino que conduce a la formulación de la llamada DMFT Estadística (*Statistical DMFT*), presentada en la subsección siguiente. La otra opción, más simple pero igualmente significativa, consiste en describir la tasa de escape de un "sitio típico" a través del promedio geométrico de la función de hibridización,

$$\operatorname{Im}\Delta_{\text{typ}}(\omega) = \exp\Big\langle \ln[\operatorname{Im}\Delta_i(\omega)]\Big\rangle, \tag{2.52}$$

el cual, a diferencia del promedio algebraico, se anula en el borde de movilidad [33][4], convirtiéndose en un parámetro de orden adecuado para la transición de localización.

En completa analogía con el esquema usual de DMFT, se formula así una extensión autoconsistente basada en esta magnitud, conocida como Teoría del Medio Típico (*Typical Medium Theory*, TMT) [35]. Considerando nuevamente el modelo de Hubbard con desorden (2.48), se reemplaza el medio aleatorio por un medio típico efectivo, descrito por una autoenergía $\Sigma_{\text{TMT}}(\omega)$. Para determinarla, se parte de la densidad local de estados en un sitio genérico $j$,

$$\rho_j(\omega) = \frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G_{jj}(\omega - i\delta), \tag{2.53}$$

y se define la densidad de estados *típica* mediante el promedio geométrico

$$\rho_{\text{typ}}(\omega) = \exp\Big[\int d\varepsilon_j\, P(\varepsilon_j)\, \ln\rho_j(\omega)\Big]. \tag{2.54}$$

Nótese que se ha continuado analíticamente al eje real, ya que es necesario disponer de una cantidad estrictamente positiva para definir un promedio geométrico. La función de Green típica se obtiene entonces a partir de la transformada de Hilbert,

$$G_{\text{typ}}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\, \frac{\rho_{\text{typ}}(\omega')}{\omega - \omega'}, \tag{2.55}$$

[4]El borde de movilidad delimita, en un sistema desordenado, la energía por debajo de la cual los estados electrónicos permanecen espacialmente extendidos y pueden contribuir al transporte, y por encima de la cual se vuelven localizados y no conducen. En presencia de fluctuaciones espaciales fuertes, el promedio aritmético de la densidad de estados no distingue entre estados extendidos y localizados, ya que está dominado por regiones donde existen contribuciones grandes pero poco representativas. En cambio, el promedio geométrico —o densidad de estados típica— es sensible a la supresión exponencial de las amplitudes de onda en la fase localizada, y se anula precisamente al cruzar el borde de movilidad, constituyéndose así en un parámetro de orden adecuado para describir la transición de localización de Anderson.

y la autoenergía del medio típico se introduce mediante,

$$G_{\text{typ}}(\omega) = \frac{1}{N_s}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{\text{TMT}}(\omega)}. \tag{2.56}$$

Finalmente, el ciclo de autoconsistencia se cierra con,

$$\Delta_{\text{typ}}(\omega) = \omega + \mu - \Sigma_{\text{TMT}}(\omega) - G^{-1}_{\text{typ}}(\omega), \tag{2.57}$$

que constituye la versión análoga de la ecuación (2.21).

Aunque la TMT sigue siendo una teoría de campo medio y, por lo tanto, no incorpora de manera completa las fluctuaciones espaciales, resulta capaz de reproducir aspectos cuantitativos relevantes de la localización electrónica. Su aplicación tanto al caso no interactuante como al modelo de Hubbard desordenado a medio llenado ha permitido predecir la existencia de fases metálicas desordenadas, aislantes de Mott y estados intermedios de tipo Mott–Anderson [33].

### 2.4.3. DMFT Estadística (statDMFT)

La limitación fundamental de la DMFT y de su extensión mediante la Teoría del Medio Típico (TMT) es que ambas se apoyan en promedios —algebraico en el caso original de DMFT, o geométrico en el caso de TMT— que no logran capturar de manera plena las fluctuaciones espaciales asociadas a la localización de Anderson. Tal como se señaló en la subsección anterior, la extensión más natural y precisa de la filosofía DMFT consiste en reemplazar dichos promedios por las realizaciones específicas de la función de hibridización local $\Delta_j(\omega)$ en cada sitio de la red [36, 37]. Como es de esperar, la complejidad de las ecuaciones aumenta considerablemente, por lo que es necesario recurrir de manera intensiva a cálculos numéricos. No obstante, este enfoque ha proporcionado numerosas ideas valiosas acerca de las transiciones de Mott–Anderson, y ha revelado un grado de universalidad mucho mayor en las distribuciones resultantes, en comparación con los marcos más "rígidos" de DMFT o TMT [33].

Como es usual, nos enfocamos en la dinámica local de un sitio genérico $j$, dictada por la acción efectiva

$$\begin{aligned} S^{(j)}_{\text{eff}} = &\sum_{\sigma}\int_0^\beta d\tau\, c^\dagger_{j\sigma}(\tau)(\partial_\tau + \varepsilon_j - \mu)c_{j\sigma}(\tau) \\ &+ \sum_{\sigma}\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau'\, c^\dagger_{j\sigma}(\tau)\,\Delta_j(\tau-\tau')\,c_{j\sigma}(\tau') + U\int_0^\beta d\tau\, n_{j\uparrow}(\tau)n_{j\downarrow}(\tau). \end{aligned} \tag{2.58}$$

La diferencia fundamental respecto de los enfoques anteriores es que ahora la función de hibridización $\Delta_j(i\omega_n)$ depende explícitamente del sitio. Cada sitio, además de poseer una energía local $\varepsilon_j$, percibe un entorno diferente descrito por $\Delta_j(i\omega_n)$. De manera análoga, la dinámica local queda caracterizada por una autoenergía también dependiente del sitio, $\Sigma_j(i\omega_n)$, obtenida

a partir de la función de Green local. En coherencia con la filosofía de DMFT, se mantiene la hipótesis de una autoenergía estrictamente local (diagonal en el espacio de sitios), aunque variable de un sitio a otro.

A diferencia de los enfoques DMFT o TMT, la statDMFT no intenta mimetizar esta autoenergía $\Sigma_j(i\omega_n)$ mediante un medio efectivo, sino que incorpora explícitamente sus fluctuaciones espaciales. Para lograrlo, se recurre a la interpretación física de la autoenergía como un corrimiento efectivo de la energía de sitio,

$$\varepsilon_j \;\rightarrow\; \varepsilon_j + \Sigma_j(i\omega_n), \tag{2.59}$$

lo cual permite expresar la propagación electrónica mediante un resolvente matricial,

$$\mathbf{G}(i\omega_n) = \left[i\omega_n \mathbf{I} - \mathbf{t} - \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\Sigma}(i\omega_n)\right]^{-1}, \tag{2.60}$$

donde $\mathbf{t}$ y $\boldsymbol{\varepsilon}$ representan, respectivamente, los términos de salto y energías locales de (2.48), y los elementos de matriz de la autoenergía son,

$$\Sigma_{ij}(i\omega_n) = \Sigma_j(i\omega_n)\,\delta_{ij}. \tag{2.61}$$

Aunque en principio cualquier elemento de este resolvente (intra- o entre-sitios) puede calcularse —lo cual resulta útil, por ejemplo, para el cómputo de la conductividad mediante el formalismo de Landauer— la condición de autoconsistencia requiere únicamente de sus elementos diagonales, vinculados a la función de Green local,

$$G_{jj}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_j - \Delta_j(i\omega_n) - \Sigma_j(i\omega_n)}, \tag{2.62}$$

que permiten actualizar iterativamente la función de hibridización en cada sitio.

El ciclo de autoconsistencia de la statDMFT puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Para una realización de desorden $\{\varepsilon_j\}$, se inicializa un conjunto de funciones de hibridización $\Delta_j(i\omega_n)$, una para cada sitio.

2. Se resuelven los problemas de impureza definidos por la acción (2.58), obteniendo para cada sitio la función de Green $G_{jj}(i\omega_n)$ y la autoenergía $\Sigma_j(i\omega_n)$.

3. Se invierte el resolvente matricial y se calculan los elementos diagonales $G_{jj}(i\omega_n)$.

4. Se actualizan las funciones de hibridización $\Delta_j(i\omega_n)$ mediante la relación (2.62).

En términos prácticos, el conjunto de ecuaciones (2.58)–(2.62) constituye la formulación de la statDMFT. Su implementación presenta dos grandes desafíos: (i) la necesidad de resolver un

conjunto de problemas de impureza, uno por cada sitio de la red, y (ii) la inversión numérica de una matriz compleja para cada frecuencia de Matsubara, lo cual resulta computacionalmente costoso. La recompensa es, sin embargo, una descripción que incorpora de manera explícita los efectos de localización de Anderson. De hecho, en el límite no interactuante la teoría se vuelve exacta, ya que la ecuación (2.60) reproduce la función de Green de una partícula, a partir de la cual pueden calcularse propiedades de transporte. En ausencia de desorden, se recuperan naturalmente las ecuaciones de DMFT. Así, en presencia simultánea de interacciones y desorden, la statDMFT constituye el marco más completo para el estudio de fermiones en redes desordenadas, que incluye únicamente efectos de correlación locales.

# 3. Cálculo de la conductividad en DMFT

El estudio de las propiedades de transporte en sistemas con electrones fuertemente correlacionados constituye una de las aplicaciones más relevantes de la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT), ya que permite establecer un puente directo entre la descripción microscópica y la observación experimental. A diferencia de magnitudes estáticas, el transporte eléctrico depende de procesos dinámicos de dispersión y relajación que involucran tanto la estructura espectral de los estados electrónicos como la forma en que éstos responden a campos externos. En este contexto, la formulación de la conductividad dentro de DMFT requiere superar un obstáculo técnico fundamental: la necesidad de obtener funciones en el eje real a partir de resultados calculados en frecuencias de Matsubara. Esta dificultad motiva la introducción de técnicas de continuación analítica, entre las cuales el método de Máxima Entropía (MaxEnt) [38] se ha consolidado como una herramienta estándar. En las secciones siguientes se presenta, en primer lugar, el marco conceptual y práctico del método MaxEnt, y posteriormente se detalla la formulación de la conductividad en términos de las funciones de Green obtenidas mediante DMFT.

## 3.1. El Método de Máxima Entropía (MaxEnt)

### 3.1.1. El problema de la continuación analítica

Las simulaciones de Monte Carlo cuántico generan típicamente funciones de Green $G(i\omega_n)$ en el dominio de frecuencias de Matsubara, o bien de tiempo imaginario $G(\tau)$ con $\tau = -it$. La rotación de Wick, $t \to i\tau$, que convierte tiempo real $t$ en tiempo imaginario $\tau$, transforma las exponenciales oscilatorias $e^{itH}$, que aparecen en la representación de Heisenberg de los operadores, en exponenciales de difusión $e^{-\tau H}$. Para $t$ grande, el operador de tiempo real se torna altamente oscilatorio haciendo ineficiente el muestreo de Monte Carlo, pues el mismo debe hacerse sobre escalas temporales cada vez más chicas para lograr las auto-cancelaciones adecuadas [38].

Aunque la rotación de Wick resuelve el problema asociado al muestro de funciones altamente oscilatorias, los resultados en tiempo o frecuencia real son cruciales para conectar las simulaciones con los experimentos. Muchas cantidades que se miden experimentalmente se vínculan con la

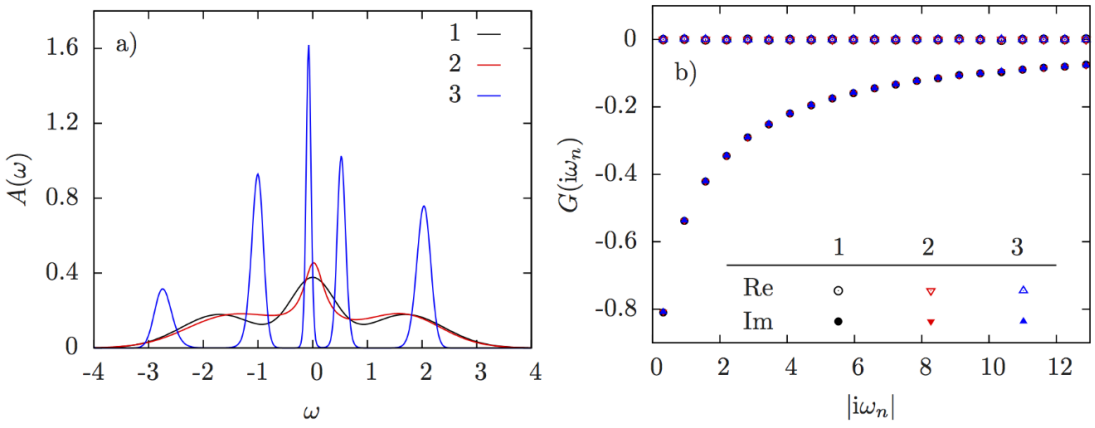


Figura 3.1.: Tres funciones espectrales distintas etiquetadas 1, 2, 3 (izquierda) y su contraparte en frecuencias imaginarias para $\beta = 10$ [39].

teoría mediante la función espectral $A(\omega)$. Si bien la relación entre $G(\tau)$ y $A(\omega)$ es lineal y simple,

$$G(\tau) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \frac{e^{-\tau\omega}}{1+e^{-\beta\omega}} \, A(\omega), \tag{3.1}$$

la naturaleza exponencial del núcleo, $K(\tau,\omega) = -\frac{e^{-\tau\omega}}{1+e^{-\beta\omega}}$, hace que su inversión, es decir, la continuación analítica de los datos en tiempo imaginario a información en frecuencia real, no sea trivial. Para $\tau$ finito y $\omega$ grande este núcleo es exponencialmente chico y $G(\tau)$ se torna insensible a las características de $A(\omega)$ a frecuencias altas. Además, el hecho de que $G(\tau)$ se obtenga a partir de los datos que surgen de una simulación de Monte Carlo agrava aún más el problema, ya que estos datos son incompletos y tienen error estadístico. El problema queda mal definido, infinitas funciones $A(\omega)$ con variaciones importantes en sus características pueden dar lugar a una misma $G(\tau)$ dentro de un cierto margen de error. Esto se ilustra en la figura 3.1.

Diferentes métodos se han propuesto para abordar el problema de la continuación analítica, entre los cuales el Método de Máxima Entropía (MaxEnt) se ha consolidado como la estrategia estándar en el marco de DMFT [38].

### 3.1.2. Regularización mediante la entropía

El método de Máxima Entropía (MaxEnt) resuelve esta dificultad formulando el problema de la continuación analítica como un problema de inferencia estadística. La función $\tilde{G}(i\omega_n)$ obtenida a partir de simulaciones de Monte Carlo es interpretada como una estimación de la función de Green exacta $G(i\omega_n)$ dentro de un cierto margen de error. El objetivo del método es entonces, encontrar la función espectral $A(\omega)$ que maximiza la probabilidad a posteriori, $P[A|\tilde{G}]$.

Si bien existen numerosas opciones para la reguralización de las soluciones, una función que

resulta particularmente útil es la entropía relativa[1],

$$S[A] = -\int d\omega \left[A(\omega) - m(\omega) - A(\omega)\ln\frac{A(\omega)}{m(\omega)}\right], \tag{3.2}$$

en donde $m(\omega)$ es una función auxiliar que se denomina *espectro por defecto* [38].

Aplicando el teorema de Bayes y considerando la validez del teorema central del límite para el ruido estadístico, se obtiene que,

$$P[A|\tilde{G}] \propto e^{-Q[A]}, \tag{3.3}$$

de modo que el problema se reduce a minimizar la funcional,

$$Q[A] = \frac{1}{2}\chi^2[A] - \alpha S[A], \tag{3.4}$$

donde $\chi^2[A]$ mide el desajuste cuadrático entre los datos numéricos y el espectro propuesto, y $\alpha$ es un parámetro de regularización que controla el equilibrio entre fidelidad a los datos y suavidad de la solución.

### 3.1.3. Ventajas y limitaciones

El método MaxEnt presenta la ventaja de proporcionar soluciones estables y físicamente razonables en presencia de ruido estadístico, evitando la aparición de oscilaciones no físicas en $A(\omega)$. La interpretación probabilística facilita la estimación de la incertidumbre asociada a las soluciones, algo difícil de lograr en enfoques puramente deterministas [39]. Asimismo, la formulación bayesiana permite incorporar información a priori mediante el espectro por defecto $m(\omega)$ [38][2].

No obstante, el método no está exento de limitaciones. La resolución espectral máxima depende en última instancia de la calidad y extensión de los datos de entrada: un mayor rango de tiempos imaginarios y una reducción sustancial del error estadístico son requisitos indispensables para poder distinguir estructuras finas en $A(\omega)$. Asimismo, la elección del parámetro de regularización $\alpha$ y del espectro por defecto $m(\omega)$ puede influir de manera apreciable en los resultados, especialmente en regiones donde los datos aportan poca información directa.

[1] Esta función surge de considerar la entropía de Shannon, $S = -\int d\omega\, \rho(\omega)\ln[\rho(\omega)]$, definida sobre una densidad de probabilidad $\rho(\omega)$, aplicada a la función espectral $A(\omega)$. En el caso fermiónico se cumple que $A(\omega) \geq 0$ y $\int d\omega\, A(\omega) < \infty$, lo que permite renormalizarla a la unidad e interpretarla como una densidad de probabilidad.

[2] Por información a priori entendemos el conocimiento previo disponible sobre el sistema antes de realizar la continuación analítica. Entre las condiciones habituales suelen incluirse: (i) la positividad de la función espectral, $A(\omega) \geq 0$; (ii) la anulación del espectro en ciertos límites, como energías muy altas; (iii) la normalización de $A(\omega)$ de acuerdo con reglas de suma físicas (por ejemplo, el número de partículas); y (iv) la presencia de simetrías conocidas en la densidad de estados. En ausencia de información adicional, suele emplearse un modelo plano como supuesto de ignorancia máxima.

Por esta razón, en la práctica suelen emplearse esquemas automáticos para seleccionar $\alpha$, como el criterio clásico de Bryan [40], o procedimientos de validación cruzada.

En síntesis, aunque sus limitaciones obligan a interpretar con cautela los detalles espectrales más sutiles, el método de Máxima Entropía se ha consolidado como la técnica estándar para realizar la continuación analítica en cálculos de DMFT y Monte Carlo cuántico, al ofrecer un balance adecuado entre estabilidad numérica y realismo físico.

## 3.2. Cálculo de la conductividad DC

En esta sección se detalla el cálculo de la conductividad de corriente directa (DC) para una red bipartita. Tal como se demuestra en el Apéndice A, este caso incluye al caso más simple de una red isótropa con invariancia traslacional.

### 3.2.1. Derivación del operador corriente

El Hamiltoniano de Hubbard para una red bipartita es el que se muestra en la ecuación (2.35),

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\left(a^{\dagger}_{i\sigma}b_{j\sigma} + b^{\dagger}_{j\sigma}a_{i\sigma}\right) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}. \tag{3.5}$$

Utilizando la sustitución de Peierls para introducir un campo electromagnético externo, se obtiene [41, 42],

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\left(a^{\dagger}_{i\sigma}b_{j\sigma}\, e^{-i\int_j^i d\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t)} + h.c.\right) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, \tag{3.6}$$

donde h.c. denota el conjugado hermítico, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, y $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ es el potencial vectorial.[3]

Si $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ varía "lento" en la escala de la distancia entre sitios, se puede aproximar

$$\int_j^i d\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \simeq \mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t), \tag{3.7}$$

con $\mathbf{R}_{ij}$ el punto medio del enlace $\langle ij\rangle$. Expandiendo en serie de Taylor se obtiene,

$$e^{-i\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)} = 1 - i\Big(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\Big) - \tfrac{1}{2}\Big(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\Big)^2 + \mathcal{O}(A^3), \tag{3.8}$$

[3]No se pierde generalidad al trabajar únicamente con el potencial vectorial, ya que siempre es posible anular el potencial escalar mediante una transformación de gauge adecuada.

y entonces resulta $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \ldots$, en donde,

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ \left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + h.c.\right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \tag{3.9}$$

$$\mathcal{H}_1 = -i \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ \left(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\right)\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} - b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma}\right), \tag{3.10}$$

$$\mathcal{H}_2 = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ \left(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\right)^2\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma}\right). \tag{3.11}$$

El operador corriente es, por definición, la derivada funcional del Hamiltoniano respecto del potencial vector,

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r},t)} \simeq -\frac{\delta\mathcal{H}_1}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r},t)} - \frac{\delta\mathcal{H}_2}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r},t)}. \tag{3.12}$$

Usando que,

$$\frac{\delta\left(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\right)}{\delta A_\alpha(\mathbf{r},\,t)} = r_{ij,\alpha}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{ij}\right), \tag{3.13}$$

obtenemos el término paramagnético,

$$j^{(p)}_\alpha(\mathbf{r},t)\ =\ -\frac{\delta\mathcal{H}_1}{\delta A_\alpha(\mathbf{r},t)}\ =\ i\sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ r_{ij,\alpha}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{ij})\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} - b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma}\right), \tag{3.14}$$

y el término diamagnético,

$$\begin{aligned} j^{(d)}_\alpha(\mathbf{r},t)\ &=\ -\frac{\delta\mathcal{H}_2}{\delta A_\alpha(\mathbf{r},t)} \\ &= \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ r_{ij,\alpha}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{ij})\ \left(\mathbf{r}_{ij}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R}_{ij},t)\right)\ \left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma}\right) \\ &= \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\ r_{ij,\alpha}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{ij})\left[\ \sum_\beta r_{ij,\beta}\,A_\beta(\mathbf{R}_{ij},t)\ \right]\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^\dagger_{j\sigma} a_{i\sigma}\right). \end{aligned} \tag{3.15}$$

del operador corriente $\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \mathbf{j}^{(p)}(\mathbf{r},t) + \mathbf{j}^{(d)}(\mathbf{r},t)$.

Asumiendo un campo uniforme $\mathbf{A}(t)$ e integrando en $\mathbf{r}$, obtenemos las siguientes expresiones para la corriente total (uniforme, $\mathbf{q}=0$)[4],

$$\begin{aligned} j^{(p)}_\alpha(t) &= i\sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\, r_{ij,\alpha}\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} - a^\dagger_{j\sigma} b_{i\sigma}\right), \\ j^{(d)}_\alpha(t) &= \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} t_{ij}\, r_{ij,\alpha}\ \left[\sum_\beta r_{ij,\beta}\,A_\beta(t)\right]\left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + a^\dagger_{j\sigma} b_{i\sigma}\right). \end{aligned} \tag{3.16}$$

[4]En el caso general $j(\mathbf{q},t) = \int d^d r\, e^{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} j(\mathbf{r},t)$, con $d$ la dimensión del sistema.

Transformando Fourier mediante las identidades,

$$a^\dagger_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}\, a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}, \qquad b_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j}\, b_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{3.17}$$

con $N$ el número total de sitios de la red, resulta

$$\begin{aligned} j^{(p)}_\alpha(t) &= -\sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[ \left(\partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}}\right) a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}}\right)^* b^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \right], \\ j^{(d)}_\alpha(t) &= -\sum_{\mathbf{k},\sigma}\sum_{\beta} A_\beta(t) \left[ \left(\partial_{k_\alpha}\partial_{k_\beta}\varepsilon_{\mathbf{k}}\right) a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}\sigma} \;+\; \left(\partial_{k_\alpha}\partial_{k_\beta}\varepsilon_{\mathbf{k}}\right)^* b^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \right]. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Sumando ambos términos obtenemos la expresión para el operador corriente total en el espacio recíproco,

$$\boxed{j_\alpha(t) = -\sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, \partial_{k_\alpha}\hat{\varepsilon}(\mathbf{k})\, \Psi_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k},\sigma}\sum_{\beta} A_\beta(t)\, \Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\, \partial_{k_\alpha}\partial_{k_\beta}\hat{\varepsilon}(\mathbf{k})\, \Psi_{\mathbf{k}\sigma}} \tag{3.19}$$

donde se han utilizado los espinores definidos en (2.36),

$$\Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} = \left(a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma},\, b^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\right), \qquad \Psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix}, \tag{3.20}$$

y se ha introducido la matriz,

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon^*_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.21}$$

### 3.2.2. Fórmula de Kubo para la conductividad DC

Una vez obtenido el operador de corriente, podemos calcular la respuesta lineal frente a un campo eléctrico externo, utilizando la fórmula de Kubo para la conductividad óptica,

$$\sigma^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{V\omega}\left[\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) + D_{\alpha\beta}\right], \tag{3.22}$$

en donde V es el volumen del sistema,

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\Big[ -i\theta(t) \left\langle \left[ j^{(p)}_\alpha(t),\, j^{(p)}_\beta(0)\right]\right\rangle\Big], \tag{3.23}$$

es el correlador retardado corriente-corriente, y

$$D_{\alpha\beta} = -\left.\frac{\partial}{\partial A_\beta}\left\langle j^{(d)}_\alpha(0)\right\rangle\right|_{\mathbf{A}=0} \tag{3.24}$$

corresponde al término diamagnético.

La parte real de (3.22) determina la absorción óptica, mientras que el límite $\omega \to 0$ define la conductividad de corriente directa (DC).

Para llegar a la expresión de la conductividad DC comencemos por desarrollar la expresión para el correlador,

$$\Pi^{R}_{\alpha\beta}(t) = -i\theta(t)\left\langle \left[ j^{(p)}_{\alpha}(t),\, j^{(p)}_{\beta}(0)\right]\right\rangle. \tag{3.25}$$

Introduciendo los correladores mayor y menor:

$$\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t) = -i\left\langle j^{(p)}_{\alpha}(t)\, j^{(p)}_{\beta}(0)\right\rangle, \qquad \Pi^{<}_{\alpha\beta}(t) = -i\left\langle j^{(p)}_{\beta}(0)\, j^{(p)}_{\alpha}(t)\right\rangle, \tag{3.26}$$

podemos escribir, $\Pi^{R}_{\alpha\beta}(t) = \theta(t)\left[\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t) - \Pi^{<}_{\alpha\beta}(t)\right]$.

En el correlador mayor tenemos el valor medio, $\left\langle j^{(p)}_{\alpha}(t)\, j^{(p)}_{\beta}(0)\right\rangle$. Escribiendo la corriente paramagnética según (3.18) y contrayendo sobre los promedios no nulos de acuerdo al teorema de Wick, resulta,

$$\begin{aligned}\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t) = -i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\Big[ & v_{\alpha}(\mathbf{k})\, v_{\beta}(\mathbf{k})\, G^{>}_{\sigma BA}(\mathbf{k},t)\, G^{<}_{\sigma BA}(\mathbf{k},-t) + \\ & + v_{\alpha}(\mathbf{k})\, v^{*}_{\beta}(\mathbf{k})\, G^{>}_{\sigma BB}(\mathbf{k},t)\, G^{<}_{\sigma AA}(\mathbf{k},-t) + \\ & + v^{*}_{\alpha}(\mathbf{k})\, v_{\beta}(\mathbf{k})\, G^{>}_{\sigma AA}(\mathbf{k},t)\, G^{<}_{\sigma BB}(\mathbf{k},-t) + \\ & + v^{*}_{\alpha}(\mathbf{k})\, v^{*}_{\beta}(\mathbf{k})\, G^{>}_{\sigma AB}(\mathbf{k},t)\, G^{<}_{\sigma AB}(\mathbf{k},-t)\Big],\end{aligned} \tag{3.27}$$

en donde hemos introducido los vértices de corriente $v_{\alpha}(\mathbf{k}) = \partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}}$ y las funciones de Green mayor y menor via las siguientes identidades,

$$\left\langle a_{\mathbf{k}\sigma}(t)\, a^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}(0)\right\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\,\delta_{\sigma\sigma'}\,(-i)\,G^{>}_{\sigma AA}(\mathbf{k},t), \qquad \left\langle a^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}(0)\, a_{\mathbf{k}'\sigma'}(t)\right\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\,\delta_{\sigma\sigma'}\,(+i)\,G^{<}_{\sigma AA}(\mathbf{k},t),$$

y las identidades análogas para la subred $B$, y los términos extra diagonales $AB$ y $BA$.

La expresión para $\Pi^{<}_{\alpha\beta}(t)$ se obtiene de manera completamente análoga. Escribiendo ambos correladores en notación compacta, resulta,

$$\begin{aligned}\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t) &= -i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\mathrm{Tr}\left[\hat{v}_{\alpha}(\mathbf{k})\,\hat{G}^{>}_{\sigma}(\mathbf{k},t)\,\hat{v}_{\beta}(\mathbf{k})\,\hat{G}^{<}_{\sigma}(\mathbf{k},-t)\right], \\ \Pi^{<}_{\alpha\beta}(t) &= -i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\mathrm{Tr}\left[\hat{v}_{\alpha}(\mathbf{k})\,\hat{G}^{<}_{\sigma}(\mathbf{k},t)\,\hat{v}_{\beta}(\mathbf{k})\,\hat{G}^{>}_{\sigma}(\mathbf{k},-t)\right].\end{aligned} \tag{3.28}$$

en donde hemos incorporado las matrices,

$$\hat{v}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \partial_{k_\alpha}\hat{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ (\partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}})^{*} & 0\end{pmatrix}, \qquad \hat{G}^{\gtrless}_{\sigma}(\mathbf{k},t) = \begin{pmatrix} G^{\gtrless}_{\sigma AA}(\mathbf{k},t) & G^{\gtrless}_{\sigma AB}(\mathbf{k},t) \\ G^{\gtrless}_{\sigma BA}(\mathbf{k},t) & G^{\gtrless}_{\sigma BB}(\mathbf{k},t)\end{pmatrix}. \tag{3.29}$$

Ahora transformamos Fourier de tiempo a frecuencia, trabajamos con $\Pi^{>}_{\alpha\beta}$ (la transformación con $\Pi^{<}$ es completamente análoga),

$$\begin{aligned}\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\, \Pi^{>}_{\alpha\beta}(t) \\ &= -\,i \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\, \mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},t)\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},-t)\Big]\,. \end{aligned} \tag{3.30}$$

Cada función de Green en tiempo real tiene su representación de Fourier,

$$\hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},t) = \int \frac{d\nu}{2\pi}\, e^{-i\nu t}\, \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},\nu), \qquad \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},-t) = \int \frac{d\nu'}{2\pi}\, e^{+i\nu' t}\, \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},\nu'), \tag{3.31}$$

de modo que,

$$\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int dt\, e^{i\omega t} \int \frac{d\nu}{2\pi}\, e^{-i\nu t} \int \frac{d\nu'}{2\pi}\, e^{+i\nu' t}\, \mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},\nu')\Big]\,. \tag{3.32}$$

Al integrar en $t$ nos aparece una delta,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i(\omega-\nu+\nu')t} = 2\pi\, \delta(\omega - \nu + \nu'). \tag{3.33}$$

Entonces,

$$\boxed{\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int \frac{d\nu}{2\pi}\, \mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},\nu+\omega)\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\Big]\,,} \tag{3.34}$$

y de la misma forma,

$$\boxed{\Pi^{<}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int \frac{d\nu}{2\pi}\, \mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},\nu+\omega)\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\Big]} \tag{3.35}$$

Para introducir las funciones espectrales hacemos uso de las siguientes relaciones[5],

$$\hat{G}^{<}_\sigma(\mathbf{k},\nu) = i f(\nu)\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu), \qquad \hat{G}^{>}_\sigma(\mathbf{k},\nu) = -i\,[1 - f(\nu)]\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu), \tag{3.36}$$

en donde $f(\nu)$ denota a la distribución de Fermi-Dirac. Entonces, escribiendo

$$A_1 = \hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu+\omega), \qquad A_0 = \hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu), \qquad f_1 = f(\nu+\omega), \qquad f_0 = f(\nu),$$

[5]Al usar estas definiciones estamos considerando la siguiente normalización para las funciones espectrales $\int \frac{d\nu}{2\pi} A(\mathbf{k},\nu) = 1$.

se obtiene,

$$\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\;\mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\,\Big(-i(1-f_1)A_1\Big)\,\hat{v}_\beta(\mathbf{k})\,(if_0A_0)\Big]$$

$$= -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\,(1-f_1)f_0\;\mathrm{Tr}[\hat{v}_\alpha A_1\hat{v}_\beta A_0]\,, \tag{3.37}$$

$$\Pi^{<}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\;\mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\,(if_1A_1)\,\hat{v}_\beta(\mathbf{k})\,\Big(-i(1-f_0)A_0\Big)\Big]$$

$$= -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\,f_1(1-f_0)\;\mathrm{Tr}[\hat{v}_\alpha A_1\hat{v}_\beta A_0]\,. \tag{3.38}$$

De modo que al restar $\Pi^{>}-\Pi^{<}$, resulta

$$\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega)-\Pi^{<}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\Big[(1-f_1)f_0-f_1(1-f_0)\Big]\;\mathrm{Tr}[\hat{v}_\alpha A_1\hat{v}_\beta A_0]$$

$$= -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\,(f_0-f_1)\;\mathrm{Tr}[\hat{v}_\alpha A_1\hat{v}_\beta A_0]\,, \tag{3.39}$$

Es decir,

$$\boxed{\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega)-\Pi^{<}_{\alpha\beta}(\omega) = -\,i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int\frac{d\nu}{2\pi}\Big[f(\nu)-f(\nu+\omega)\Big]\;\mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\,\hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu+\omega)\,\hat{v}_\beta(\mathbf{k})\,\hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\Big]\,.} \tag{3.40}$$

Volviendo al punto de partida,

$$\Pi^{R}_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\,e^{i\omega t}\,\theta(t)\,\Big[\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t)-\Pi^{<}_{\alpha\beta}(t)\Big], \tag{3.41}$$

de modo que al escribir,

$$\Pi^{\gtrless}_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\,e^{i\omega t}\,\Pi^{\gtrless}_{\alpha\beta}(t), \tag{3.42}$$

resulta (por expresión de la transformada de Fourier inversa),

$$\Pi^{>}_{\alpha\beta}(t)-\Pi^{<}_{\alpha\beta}(t) = \int\frac{d\omega'}{2\pi}\,e^{-i\omega' t}\,\Big[\Pi^{>}_{\alpha\beta}(\omega')-\Pi^{<}_{\alpha\beta}(\omega')\Big]. \tag{3.43}$$

Luego al reemplazar, obtenemos,

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t}\, \theta(t) \int \frac{d\omega'}{2\pi}\, e^{-i\omega' t} \left[\Pi^>_{\alpha\beta}(\omega') - \Pi^<_{\alpha\beta}(\omega')\right]$$

$$= \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\Pi^>_{\alpha\beta}(\omega') - \Pi^<_{\alpha\beta}(\omega')\right] \int_0^{\infty} dt\, e^{i(\omega-\omega')t}. \tag{3.44}$$

Utilizando la identidad de Sokhotski–Plemelj,

$$\int_0^{\infty} dt\, e^{i(\omega-\omega')t} = \frac{i}{\omega - \omega' + i0^+},$$

nos queda que,

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi}\, \frac{i}{\omega - \omega' + i0^+} \left[\Pi^>_{\alpha\beta}(\omega') - \Pi^<_{\alpha\beta}(\omega')\right]. \tag{3.45}$$

Entonces,

$$\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \int \frac{d\nu}{2\pi}\, \frac{f(\nu) - f(\nu+\omega')}{\omega - \omega' + i0^+}\, \mathrm{Tr}\left[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu+\omega')\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu)\right]. \tag{3.46}$$

Haciendo el cambio de variables $\nu' = \nu + \omega' \;\Rightarrow\; \omega' = \nu' - \nu$, $d\omega' = d\nu'$, resulta finalmente,

$$\boxed{\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \iint \frac{d\nu\, d\nu'}{(2\pi)^2}\, \frac{f(\nu) - f(\nu')}{\omega - (\nu' - \nu) + i0^+}\, \mathrm{Tr}\left[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu')\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu)\right].} \tag{3.47}$$

Usando que

$$\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x),$$

resulta,

$$\Re\, \Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \iint \frac{d\nu\, d\nu'}{(2\pi)^2}\, \frac{f(\nu) - f(\nu')}{\omega - (\nu' - \nu)}\, \mathrm{Tr}\left[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu')\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu)\right], \tag{3.48}$$

$$\Im\, \Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = -\,\pi \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int \frac{d\nu}{(2\pi)^2} \left[f(\nu) - f(\nu+\omega)\right]\, \mathrm{Tr}\left[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu+\omega)\, \hat{v}_\beta(\mathbf{k})\, \hat{A}_\sigma(\mathbf{k}, \nu)\right]. \tag{3.49}$$

En el límite $\omega \to 0$, $\Re\, \Pi^R_{\alpha\beta}(0) + D_{\alpha\beta} = 0$, la parte real del término paramagnético cancela al término estático diamagnético.

Finalmente, la conductividad DC resulta,

$$\boxed{\sigma^{\alpha\beta}_{\mathrm{DC}} = \lim_{\omega\to 0} \sigma^{\alpha\beta}(\omega) = \lim_{\omega\to 0} \frac{1}{V\omega}\, \Im\, \Pi^R_{\alpha\beta}(\omega).} \tag{3.50}$$

Entonces,

$$\boxed{\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \frac{\pi}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int \frac{d\nu}{(2\pi)^2}\Big[-\partial_\nu f(\nu)\Big]\ \mathrm{Tr}\Big[\hat{v}_\alpha(\mathbf{k})\,\hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\,\hat{v}_\beta(\mathbf{k})\,\hat{A}_\sigma(\mathbf{k},\nu)\Big]\,.} \tag{3.51}$$

Desarrollando la traza explícitamente,

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \frac{\pi}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int \frac{d\nu}{(2\pi)^2}\Big[-\partial_\nu f(\nu)\Big]\Big[&(v_\alpha^* v_\beta + v_\alpha v_\beta^*)\,A_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu)A_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu)\\ &+ v_\alpha^* v_\beta^*\left(A_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu)\right)^2 + v_\alpha v_\beta\left(A_\sigma^{BA}(\mathbf{k},\nu)\right)^2\Big].\end{aligned} \tag{3.52}$$

Si la energía de dispersión $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es real, de modo que $v_\alpha^* = v_\alpha$ y $A_{AB} = A_{BA}$, obtenemos,

$$\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \int \frac{d\nu}{2\pi}\Big[-\partial_\nu f(\nu)\Big]\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma} v_\alpha(\mathbf{k})\,v_\beta(\mathbf{k})\Big[A_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu)A_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu) + \left(A_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu)\right)^2\Big], \tag{3.53}$$

en donde, recordemos la suma en $\mathbf{k}$ es sobre los vectores de la zona de Brillouin reducida,

$$\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{RBZ}}\sum_{\sigma} v_\alpha(\mathbf{k})\,v_\beta(\mathbf{k})\Big[A_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu)A_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu) + \left(A_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu)\right)^2\Big]. \tag{3.54}$$

Tal como se demuestra en el Apéndice A, en redes bipartitas con saltos simétricos a primeros vecinos, para cualquier función $f$ de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ vale que (A.14),

$$\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{RBZ}}\Big[f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f(-\varepsilon_{\mathbf{k}})\Big]. \tag{3.55}$$

En particular, si $f$ es una función par de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, es decir, tal que $f(-\varepsilon_{\mathbf{k}}) = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, resulta (A.15),

$$\boxed{\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{RBZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad \text{si } f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \text{ es par.}} \tag{3.56}$$

En la suma (3.54) el factor

$$v_\alpha(\mathbf{k})\,v_\beta(\mathbf{k}) = \frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\beta}$$

es par en $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Respecto al producto de las funciones espectrales, tenemos que,

$$A_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\,G_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\left\{\frac{\zeta_{B\sigma}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}\right\}, \tag{3.57}$$

$$A_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\,G_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\left\{\frac{\zeta_{A\sigma}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}\right\}, \tag{3.58}$$

$$A_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\,G_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu) = -2\,\Im\left\{\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}\right\}, \tag{3.59}$$

en donde, $\zeta_{A\sigma} = \nu + \mu - \Sigma_{A\sigma}$, y $\zeta_{B\sigma} = \nu + \mu - \Sigma_{B\sigma}$.

En DMFT (o en el límite de dimensión infinita), las auto-energías $\Sigma_{A\sigma}$ y $\Sigma_{B\sigma}$ son locales, independientes de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, y por lo tanto, $\zeta_{A\sigma} = \zeta_{A\sigma}(\nu)$ y $\zeta_{B\sigma} = \zeta_{B\sigma}(\nu)$.

Luego, el denominador $\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2$ es una función par de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, de modo que $A_\sigma^{AA}$ y $A_\sigma^{BB}$ son funciones pares de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

Respecto al término extra-diagonal,

$$A_\sigma^{AB} \propto \Im\left\{\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}\right\}, \tag{3.60}$$

es impar, pero $\left(A_\sigma^{AB}\right)^2$ es par.

Por lo tanto, en DMFT o en dimensión infinita, la suma en $\mathbf{k}$ de la fórmula para la conductividad (3.53) es sobre una función par de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Utilizando la identidad (3.56), para convertir la suma sobre la zona reducida de Brillouin (RBZ) en una suma sobre la zona de Brillouin completa (BZ), obtenemos

$$\boxed{\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\int \frac{d\nu}{2\pi}\left[-\partial_\nu f(\nu)\right]\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{BZ}}\sum_\sigma v_\alpha(\mathbf{k})\, v_\beta(\mathbf{k})\left[A_\sigma^{AA}(\mathbf{k},\nu)A_\sigma^{BB}(\mathbf{k},\nu) + \left(A_\sigma^{AB}(\mathbf{k},\nu)\right)^2\right].} \tag{3.61}$$

Si transformamos la suma en $\mathbf{k}$ en una integral en energía mediante la definición,

$$\rho_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\in\mathrm{BZ}} v_\alpha(\mathbf{k})\, v_\beta(\mathbf{k})\, \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \tag{3.62}$$

obtenemos finalmente,

$$\boxed{\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\sum_\sigma \int \frac{d\nu}{2\pi}\left[-\partial_\nu f(\nu)\right]\int d\varepsilon\, \rho_{\alpha\beta}(\varepsilon)\left[A_\sigma^{AA}(\varepsilon,\nu)\, A_\sigma^{BB}(\varepsilon,\nu) + \left(A_\sigma^{AB}(\varepsilon,\nu)\right)^2\right].} \tag{3.63}$$

En donde el primer factor "$[-\partial_\nu f(\nu)]$" actúa como un *filtro térmico*, seleccionando las energías relevantes en torno al nivel de Fermi, mientras que el término de los productos espectrales "$\left(A^{AA}A^{BB} + (A^{AB})^2\right)$" contiene la *física de interacción* del sistema. La función $\rho_{\alpha\beta}(\varepsilon)$, por su parte, refleja la *estructura de transporte de la red* a través de los vértices de velocidad.

### 3.2.3. Aplicación a la red hipercúbica de dimensión infinita

En el caso particular de la red hipercúbica de dimensión $d$, para la cual,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j), \tag{3.64}$$

de modo que,

$$v_\alpha(\mathbf{k}) = -2t\, \sin(k_\alpha), \qquad v_\beta(\mathbf{k}) = -2t\, \sin(k_\beta), \tag{3.65}$$

es posible demostrar que [43],

$$\rho_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \delta_{\alpha\beta}\, \frac{2t^2}{V_c} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi}\, e^{-is\varepsilon} \Big[J_0(2st)\Big]^d + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi}\, e^{-is\varepsilon} \Big[J_0(2st)\Big]^{d-1} J_2(2st) \right], \tag{3.66}$$

en donde $J_0$ y $J_2$ son funciones de Bessel de primera especie, y $V_c$ es el volumen de la celda unidad del sistema[6]. El primer término dentro del corchete corresponde a la densidad de estados no interactúante de la red en dimensión $d$[7],

$$\rho(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi}\, e^{-is\varepsilon} \Big[J_0(2st)\Big]^d. \tag{3.67}$$

Tomando el límite de dimensión infinita, utilizando el escalado usual de DMFT $t = t^*/\sqrt{2d}$, se tiene que,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi}\, e^{-is\varepsilon} \Big[J_0(2st)\Big]^{d-1} J_2(2st) \;\xrightarrow[d\to\infty]{}\; 0, \tag{3.68}$$

y,

$$\rho(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi}\, e^{-is\varepsilon} \Big[J_0(2st)\Big]^d \;\xrightarrow[d\to\infty]{}\; \rho^{(\infty)}(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\, t^*} \exp\Big(-\frac{\varepsilon^2}{2t^{*2}}\Big). \tag{3.69}$$

Para la red hipercúbica de dimensión infinita resulta entonces,

$$\rho_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \delta_{\alpha\beta}\, \frac{t^{*2}}{dV_c}\, \rho^{(\infty)}(\varepsilon). \tag{3.70}$$

Reemplazando en la expresión general para la conductividad, se obtiene

$$\sigma_{\mathrm{DC}}^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\, \frac{t^{*2}}{2dV_c} \sum_\sigma \int \frac{d\nu}{2\pi} \int d\varepsilon \Big[-\partial_\nu f(\nu)\Big]\, \rho^{(\infty)}(\varepsilon) \Big[ A_\sigma^{AA}(\varepsilon,\nu)\, A_\sigma^{BB}(\varepsilon,\nu) + \Big(A_\sigma^{AB}(\varepsilon,\nu)\Big)^2 \Big]. \tag{3.71}$$

En el límite $d \to \infty$, la red es isótropa y el tensor de conductividad se vuelve proporcional a la identidad. En consecuencia, carece de sentido físico distinguir entre direcciones espaciales, y

[6] $V_c$ aparece al escribir $V = NV_c$, con $N$ el número de celdas.
[7] Se obtiene de transformar Fourier $\rho(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})$ y usar que $J_0(z) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-iz\cos k}$.

resulta más natural considerar la traza del tensor,

$$\sigma_{\rm DC} = \sum_{\alpha} \sigma_{\rm DC}^{\alpha\alpha}. \tag{3.72}$$

Dado que todas las componentes son equivalentes, esta suma elimina el factor $1/d$ proveniente de la definición de $\rho_{\alpha\beta}(\varepsilon)$. De esta manera, la conductividad total puede escribirse como,

$$\boxed{\sigma_{\rm DC} = \sigma_0 \sum_{\sigma} \int \frac{d\nu}{2\pi} \int d\varepsilon \Big[ -\partial_\nu f(\nu)\Big] \rho^{(\infty)}(\varepsilon) \Big[ A_\sigma^{AA}(\varepsilon,\nu)\, A_\sigma^{BB}(\varepsilon,\nu) + \Big(A_\sigma^{AB}(\varepsilon,\nu)\Big)^2\Big],} \tag{3.73}$$

donde se ha introducido el prefactor $\sigma_0 \equiv t^{*2}/(2V_c)$. Si se desea recuperar unidades físicas, esta expresión debe multiplicarse por un factor[8],

$$\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{\hbar^2} \cdot a^2. \tag{3.74}$$

Usando que para la red hipercúbica $V_c = a^d$, resulta,

$$\sigma_0^{(SI)} \equiv \frac{e^2}{\hbar^3} \cdot \frac{t^{*2}}{2a^{d-2}}, \tag{3.75}$$

en donde el factor $t^{*2}/(2a^{d-2})$ es de carácter geométrico[9].

A lo largo de esta derivación hemos utilizado funciones espectrales normalizadas a $2\pi$,

$$\int \frac{d\nu}{2\pi} A(\varepsilon,\nu) = 1.$$

Si en cambio se trabajara con funciones espectrales normalizadas a 1,

$$\int d\nu \tilde{A}(\varepsilon,\nu) = 1,$$

tales que $A(\varepsilon,\nu) = 2\pi\, \tilde{A}(\varepsilon,\nu)$, al reemplazar en las fórmulas de la conductividad nos aparece un prefactor $4\pi$, resultando en la siguiente expresión para la conductividad DC en la red hipercúbica,

$$\boxed{\sigma_{\rm DC} = 2\pi\, \sigma_0 \sum_{\sigma} \int d\nu \int d\varepsilon \Big[ -\partial_\nu f(\nu)\Big] \rho^{(\infty)}(\varepsilon) \Big[ \tilde{A}_\sigma^{AA}(\varepsilon,\nu)\, \tilde{A}_\sigma^{BB}(\varepsilon,\nu) + \Big(\tilde{A}_\sigma^{AB}(\varepsilon,\nu)\Big)^2\Big].} \tag{3.76}$$

[8] El primer factor, $\frac{1}{\hbar}$, viene de la definición del correlador en unidades SI, $\Pi^R(t) = -(i/\hbar)\theta(t)\,\langle\big[j_\alpha^{(p)}(t),\, j_\beta^{(p)}(0)\big]\rangle$. El segundo factor $e^2a^2/\hbar^2$ proviene de los vértices de velocidad $e\,\nu_\alpha(\mathbf{k}) = (e/\hbar)\,\partial_{k_\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

[9] Usando que cada función espectral tiene unidades de inverso de frecuencia, es decir, $s$ (segundos), y que las integrales $\int d\nu\, \partial_\nu f(\nu)$, $\int d\varepsilon\, \rho^{(\infty)}(\varepsilon)$, son adimensionales, se obtienen las unidades correctas para la conductividad, $\big[\sigma_{\rm DC}\big] = S\, m^{-(d-2)}$ ($S/m$, para $d = 3$).

# Parte I.

# Propiedades magnéticas y de transporte del modelo de Hubbard antiferromagnético

En los últimos años, el interés por los materiales antiferromagnéticos ha crecido de manera notable, impulsado por su reconocimiento como candidatos prometedores para aplicaciones espintrónicas [44, 45]. Tradicionalmente, la espintrónica se ha basado en materiales ferromagnéticos, en los cuales la manipulación de la magnetización macroscópica permite controlar corrientes de espín y carga. Sin embargo, los sistemas antiferromagnéticos presentan una serie de ventajas intrínsecas que los distinguen de los ferromagnéticos: son insensibles a los campos magnéticos externos, exhiben dinámicas de espín ultrarrápidas —varios órdenes de magnitud más rápidas que en los ferromagnetos— y permiten una mayor densidad de integración en dispositivos gracias a la ausencia de campos de fuga. Además, los compuestos antiferromagnéticos son extraordinariamente abundantes y diversos, abarcando aislantes, semiconductores, metales e incluso superconductores. El descubrimiento de los denominados torques de espín asociados al orden de Néel (*Néel-order spin–orbit torques*) [46] ha abierto el camino para su utilización como elementos activos en dispositivos espintrónicos [44, 45]. No obstante, la detección y manipulación de su estado magnético siguen representando un desafío fundamental, debido a la ausencia de magnetización neta y al débil acoplamiento con sondas externas [47].

En este contexto, el modelo de Hubbard constituye un marco teórico mínimo pero sumamente versátil para investigar la interrelación entre magnetismo, correlaciones electrónicas y fenómenos de transporte en materiales antiferromagnéticos fuertemente correlacionados. Si bien la Teoría de Campo Medio Dinámico (DMFT) ha sido ampliamente aplicada al estudio del modelo de Hubbard —en particular en su formulación de sitio único [12]— la caracterización detallada de la respuesta magnética en la fase antiferromagnética ha recibido sorprendentemente poca atención. Los capítulos que integran esta primera parte de la tesis buscan contribuir a llenar este vacío, esclareciendo los mecanismos fundamentales que gobiernan la respuesta magnética y de transporte en sistemas antiferromagnéticos correlacionados, y proporcionando una base de referencia sólida para estudios futuros.

El **Capítulo 4** está dedicado al análisis de la magnetorresistividad y su evolución con la intensidad del campo aplicado y la temperatura en el modelo de Hubbard a llenado mitad. En el **Capítulo 5** se exploran las propiedades del modelo fuera de llenado mitad; en este régimen, la aplicación de un campo magnético externo da lugar a un rico paisaje de transporte espín-selectivo. El **Capítulo 6** aborda la aparición de comportamientos metamagnéticos en el régimen de bajas temperaturas y campos altamente intensos.

# 4. Magnetorresistencia en el modelo de Hubbard Antiferromagnético

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos para la magnetorresistencia en el modelo de Hubbard antiferromagnético, estudiado a llenado mitad mediante la Teoría de Campo Medio Dinámico de sitio único. El trabajo, desarrollado en colaboración con Marcelo Rozenberg y Alberto Camjayi [29], se centra en identificar los mecanismos fundamentales que gobiernan la respuesta de transporte bajo un campo magnético, prestando especial atención a la influencia de las fluctuaciones locales y a la transición entre los regímenes aislante y metálico.

Los resultados muestran que la MR en la fase AF surge de un mecanismo de dispersión dependiente de la subred, análogo —aunque físicamente distinto— al de la magnetorresistencia gigante (GMR) observada en heteroestructuras ferromagnéticas (FM). Este comportamiento es consecuencia de la ruptura de la simetría de Néel entre subredes inducida por el campo externo. El aumento progresivo tanto de la intesidad del campo aplicado como de la temperatura del sistema conduce a una supresión gradual del orden de Néel y a una transición de tipo metal–aislante, reflejada en un cambio de signo en la magnetorresitencia.

Los resultados teóricos obtenidos se comparan con observaciones en materiales fuertemente correlacionados. Estas comparaciones demuestran que el modelo minimalista empleado captura rasgos universales de la respuesta de magnetotransporte de sistemas reales, proporcionando un marco conceptual útil para la interpretación de fenómenos de magnetorresistencia en materiales complejos.

## 4.1. Magnetorresistencia: concepto y clasificación

La magnetorresistencia (MR) se refiere al cambio en la resistividad eléctrica de un material cuando se lo somete a un campo magnético externo. La MR, habitualmente expresada como un porcentaje, se define como

$$\mathrm{MR}(h) = \frac{\rho(h) - \rho(0)}{\rho(0)}, \tag{4.1}$$

donde $\rho(h)$ y $\rho(0)$ son las resistividades medidas en presencia y en ausencia de un campo magnético $h$, respectivamente.

El estudio de la MR posee una larga y rica historia dentro de la física de la materia condensada. A partir del primer informe de William Thomson (Lord Kelvin) sobre la dependencia de la resistividad con la magnetización en metales ferromagnéticos (FM) [48], la MR ha encontrado múltiples aplicaciones en un amplio rango de tecnologías, que van desde el almacenamiento magnético y los sensores de campo, hasta el control electrónico y la computación. En metales simples, la MR suele ser positiva, indicando que la resistividad aumenta al aplicar un campo magnético. Sin embargo, en ciertas aleaciones de metales de transición y en compuestos FM también se han observado comportamientos de MR negativa. Dependiendo de su magnitud y de su origen físico, pueden distinguirse varias clases de MR: la MR ordinaria (OMR), la MR gigante (GMR), la MR colosal (CMR) y la MR túnel (TMR).

### 4.1.1. Magnetorresistencia ordinaria (OMR)

En metales no magnéticos, la aplicación de un campo magnético provoca la deflexión de las trayectorias de los portadores de carga debido a la fuerza de Lorentz. Este desvío modifica las trayectorias electrónicas dentro del material, aumentando la probabilidad de eventos de dispersión y, en consecuencia, la resistividad eléctrica crece. Este fenómeno, conocido como magnetorresistencia ordinaria (OMR, por sus siglas en inglés), es típicamente pequeño —del orden del 5 %— presenta signo positivo y exhibe una dependencia cuadrática con el campo, $\mathrm{MR} \propto h^2$, en el régimen de campos y temperaturas bajas.

### 4.1.2. Magnetorresistencia gigante (GMR)

Los físicos Albert Fert y Peter Grünberg recibieron el Premio Nobel de Física por el descubrimiento de la MR gigante (GMR) [49–51]. A diferencia de la OMR, la GMR es un efecto negativo y de magnitud mucho mayor —típicamente entre un 10 % y un 50 %, o incluso superior— que se manifiesta en heteroestructuras multicapa formadas por materiales FM y no magnéticos, como las multiláminas Fe/Cr y Co/Cu [50].

Tal como se muestra de manera esquemática en la figura 4.1, en estos dispositivos, cuando los momentos magnéticos de las capas FM se encuentran alineados de manera paralela, la dispersión de los electrones es débil y la resistividad resulta baja. Por el contrario, cuando las magnetizaciones son antiparalelas, la dispersión aumenta y la resistividad se incrementa. Dado que un campo magnético externo tiende a alinear los momentos en una configuración paralela, la resistividad disminuye con el campo, originando así una MR de signo negativo.

El origen microscópico de este efecto se encuentra en la naturaleza espín-dependiente de los procesos de dispersión electrónica en sistemas multicapa. Cuando las capas FM se magnetizan de manera paralela, los electrones en el canal de espín paralelo atraviesan la estructura experimentando una dispersión mucho menor que la de los electrones con espín

Figura 4.1.: Esquema del efecto de magnetorresistencia gigante (GMR) en una estructura multicapa Fe/Cr/Fe [52]. A la izquierda se muestra la variación de la resistencia normalizada $R/R_{(H=0)}$ en función del campo magnético $H$ para diferentes espesores de las capas de Cr, observándose una disminución pronunciada de la resistividad al superar el campo de saturación $H_s$. A la derecha se representan las configuraciones magnéticas de las capas FM: en ausencia de campo ($H = 0$), los momentos se orientan de forma antiparalela, generando una resistencia alta; mientras que bajo un campo suficientemente intenso ($H = H_s$), los momentos se alinean paralelamente, reduciendo la dispersión electrónica y la resistividad total del sistema. Las lineas rojas indican el sentido de la corriente eléctrica que atraviesa la estructura.

opuesto. En cambio, cuando las capas están alineadas antiparalelamente, ambos tipos de electrones encuentran al menos una capa donde su espín es opuesto a la magnetización local, lo que incrementa fuertemente la dispersión y la resistividad global del sistema.

### 4.1.3. Magnetorresistencia colosal (CMR)

La magnetorresistencia colosal (CMR, por sus siglas en inglés) se observa principalmente en manganitas con estructura tipo perovskita y suele superar a la GMR en más de un orden de magnitud, alcanzando valores de MR superiores al 100 % [53, 54]. Los mecanismos microscópicos que dan origen a este fenómeno son complejos y se atribuyen a la coexistencia e interacción de varios efectos: el doble intercambio entre los iones de manganeso, las distorsiones de Jahn–Teller asociadas al acoplamiento entre los grados de libertad electrónicos y reticulares, y la separación de fases entre regiones metálicas y aislantes [55].

Los compuestos prototípicos que exhiben CMR son las manganitas fuertemente correlacionadas de la familia $La_{1-x}Sr_xMnO_3$, que han sido objeto de extensos estudios experimentales y teóricos [53, 54]. En estos sistemas, la aplicación de un campo magnético externo favorece la alineación de los momentos locales de los átomos de Mn y promueve la itinerancia de los electrones $e_g$, lo que conduce a una drástica reducción de la resistividad y a la aparición del característico efecto colosal.

### 4.1.4. Magnetorresistencia túnel (TMR)

La magnetorresistencia túnel (TMR) se manifiesta en heteroestructuras magnéticas y no magnéticas que incluyen una barrera aislante de espesor nanométrico. En estos sistemas, la corriente eléctrica se produce por el efecto túnel cuántico de los electrones a través de la barrera, y la probabilidad de transmisión depende fuertemente del alineamiento relativo de los momentos magnéticos a ambos lados de la misma [49, 51].

Cuando las magnetizaciones de los electrodos FM están alineadas de manera paralela, la probabilidad de que ocurra el efecto túnel aumenta y la resistencia total del dispositivo disminuye. En cambio, cuando las magnetizaciones son antiparalelas, el acoplamiento entre los estados electrónicos de espín opuesto se reduce, suprimiendo la transmisión y elevando la resistividad. Este contraste entre configuraciones paralela y antiparalela da origen a una MR negativa, análoga en su manifestación macroscópica a la GMR, pero de origen microscópico diferente.

Los efectos de la TMR se han observado en uniones del tipo $Co/Al_2O_3/Co$ y en heteroestructuras basadas en manganitas con estructura perovskita, donde la alta polarización de espín de los portadores de carga amplifica el contraste de conductancia entre los dos estados magnéticos.

### 4.1.5. Interés en los sistemas antiferromagnéticos

En todos los fenómenos descritos anteriormente, el ferromagnetismo desempeña un papel crucial. Se han propuesto análogos antiferromagnéticos (AF), como la GMR y la TMR AF, en las denominadas válvulas de espín y uniones túnel AF; sin embargo, la realización experimental de estos análogos AF sigue siendo un desafío [56].

No obstante, los materiales AF son cada vez más reconocidos como candidatos prometedores para aplicaciones espintrónicas. Sus ventajas inherentes frente a los sistemas FM incluyen insensibilidad a los campos magnéticos externos, dinámicas de espín ultrarrápidas —varios órdenes de magnitud más rápidas que en ferromagnetos— y una mayor densidad de integración en dispositivos debido a la ausencia de campos de fuga [57, 58]. Cabe destacar, además, que los antiferromagnetos reales abarcan una enorme variedad de clases electrónicas —desde aislantes y semiconductores hasta metales e incluso superconductores—, lo que refuerza el interés en identificar mecanismos universales de magnetotransporte en sistemas AF correlacionados.

El descubrimiento de los denominados torques de espín-órbita asociados al orden de Néel [59] ha abierto el camino para la utilización de materiales AF como elementos activos en dispositivos espintrónicos [57, 58]. Sin embargo, a pesar de estas características prometedoras, aún persisten desafíos importantes: la manipulación y detección del estado magnético en los antiferromagnetos resulta considerablemente más difícil que en los ferromagnetos, debido a la ausencia de magnetización neta y al acoplamiento típicamente débil con las sondas externas.

Para explorar los mecanismos fundamentales que subyacen a la MR en sistemas AF correlacionados, recurrimos a uno de los modelos más estudiados y paradigmáticos de la física del estado sólido: el modelo de Hubbard de una banda.

## 4.2. Modelo y formulación teórica

Tal como se expuso en la introducción, en esta sección se estudian las propiedades de magnetotransporte del modelo de Hubbard. A llenado mitad, este modelo presenta un estado fundamental AF en una red bipartita [12]. Si bien sus propiedades magnéticas y espectrales han sido ampliamente analizadas a lo largo de los años [12, 60–62], el comportamiento de la MR ha recibido relativamente poca atención. Una excepción destacada es el trabajo de Li *et al.* [63], quienes investigaron una cadena de Hubbard unidimensional con interacciones periódicamente moduladas y encontraron una MR intensificada, subrayando la importancia de la bipartición de la red.

En el presente trabajo resolvemos el modelo de Hubbard a llenado mitad sobre una red hipercúbica de dimensión infinita, utilizando la formulación de sitio único de la DMFT [12], y

estudiamos su comportamiento bajo la aplicación de un campo magnético tipo Zeeman $h$[1]. El objetivo es identificar los mecanismos básicos responsables de la MR en la fase AF y establecer un punto de referencia teórico para futuros estudios de materiales específicos.

### 4.2.1. El modelo

Para tener en cuenta la estructura bipartita de la red, introducimos los operadores $a^\dagger$ y $b^\dagger$, que actúan sobre las dos subredes interpenetradas $A$ y $B$, respectivamente. El Hamiltoniano del sistema se expresa como

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} \left(a^\dagger_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^\dagger_{i\sigma} a_{j\sigma}\right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} - h \sum_i S^z_i, \tag{4.2}$$

donde $a^\dagger_{i\sigma}$ y $b^\dagger_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}$ y $b_{i\sigma}$) son los operadores de creación (aniquilación) para un electrón con espín $\sigma$ en el sitio $i$ de la subred correspondiente. Aquí, $t$ representa la amplitud de salto entre sitios vecinos $\langle ij\rangle$, $U$ es la repulsión de Coulomb en el mismo sitio, $\mu$ el potencial químico, y $h$ la intensidad del campo magnético externo aplicado a lo largo del eje $z$. El operador $n_{i\sigma}$ denota el número de electrones con espín $\sigma$ en el sitio $i$, y $S^z_i$ es la componente $z$ del operador de espín local.

Transformando Fourier del término cinético de la Ec. (4.2), obtenemos

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = \sum_\sigma \sum_{\mathbf{k}\in \text{MBZ}} \Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{4.3}$$

donde la suma se restringe a la zona de Brillouin magnética (MBZ), $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ representa la dispersión de la red, y $\Psi^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} = \left(a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma},\, b^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\right)$ es el espinor formado por los operadores de creación asociados a las dos subredes.

A partir de esta expresión, la función de Green matricial del sistema puede escribirse como

$$\mathbf{G}_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}\in \text{MBZ}} \begin{pmatrix} \zeta_{A\sigma} & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_{B\sigma} \end{pmatrix}^{-1}, \tag{4.4}$$

donde $\zeta_{\alpha\sigma} = i\omega_n + \mu + \sigma h - \Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)$ con $\alpha = A, B$. Aquí, $\Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)$ representa la autoenergía

[1]En este trabajo se considera únicamente el acoplamiento Zeeman del campo magnético al espín electrónico, y se descartan los efectos orbitales (introducidos mediante fases de Peierls en los términos de salto), dado que el objetivo es estudiar los mecanismos que gobiernan la MR en materiales correlacionados. La consecuencia más espectacular de los efectos orbitales es la aparición de la célebre "mariposa de Hofstadter", cuya física requiere campos magnéticos extremadamente intensos, inalcanzables en sólidos reales [64]. No obstante, dicho régimen puede accederse en estructuras artificiales como redes ópticas de átomos fríos o superredes de tipo moiré. A intensidades de campo magnético realizables experimentalmente, el acoplamiento orbital conduce en cambio a oscilaciones cuánticas, cuyo entrelazamiento con las correlaciones electrónicas fuertes da lugar a fenómenos altamente complejos que continúan siendo objeto de intensa investigación [64, 65].

local en cada subred, evaluada en las frecuencias de Matsubara.

### 4.2.2. Solución mediante DMFT

La resolución del modelo se lleva a cabo mediante la DMFT, la cual permite mapear un modelo de red interactuante sobre un problema efectivo de impureza cuántica acoplado a un baño electrónico determinado de manera autoconsistente [12].

En ausencia de campo magnético externo ($h = 0$), el sistema exhibe orden AF de tipo Néel, en el cual las subredes $A$ y $B$ presentan magnetizaciones opuestas. En este caso, la simetría de Néel permite reducir el problema a una única impureza, ya que las funciones de Green y las autoenergías satisfacen las relaciones $\Sigma_{A\sigma}(i\omega_n) = \Sigma_{B\bar{\sigma}}(i\omega_n)$ y $G_{A\sigma}(i\omega_n) = G_{B\bar{\sigma}}(i\omega_n)$, tal como se discute en el Capítulo 2, Sección 2.3.

Sin embargo, en presencia de un campo magnético externo aplicado a lo largo del eje de cuantización, la simetría de Néel se rompe: el campo Zeeman acopla de manera distinta a los electrones con espín paralelo y antiparalelo, generando magnetizaciones desbalanceadas entre las subredes. En consecuencia, deben considerarse explícitamente dos problemas de impureza independientes —uno por cada subred—. A primera vista, esto podría parecer incompatible con el esquema de DMFT de sitio único, ya que la estructura bipartita sugiere un problema intrínsecamente de dos sitios. No obstante, la idea clave es que es posible resolver dos problemas de impureza de sitio único —uno por cada subred— siempre que se encuentren acoplados de manera autoconsistente a través de las funciones de hibridación $\Delta_{A\sigma}(i\omega_n)$ y $\Delta_{B\sigma}(i\omega_n)$. Este enfoque representa el caso general de una red bipartita en DMFT bajo campo magnético (Subsección 2.3.1) y permite capturar la retroalimentación mutua entre las fluctuaciones locales de ambas subredes sin violar la hipótesis de localidad de la autoenergía.

Las ecuaciones de autoconsistencia adoptan entonces la forma

$$\mathcal{G}^{-1}_{0,\alpha\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu + \sigma h - \Delta_{\bar{\alpha}\sigma}(i\omega_n), \tag{4.5}$$

donde $\alpha = A, B$ y $\bar{\alpha}$ denota la subred complementaria. Las funciones de hibridación $\Delta_{\alpha\sigma}$ se determinan a partir de las funciones de Green locales obtenidas por integración en energía,

$$G_{\alpha\sigma}(i\omega_n) = \zeta_{\bar{\alpha}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, \frac{D(\varepsilon)}{\zeta_{A\sigma}\zeta_{B\sigma} - \varepsilon^2}, \tag{4.6}$$

donde $D(\varepsilon)$ es la densidad de estados de la red hipercúbica y $\zeta_{\alpha\sigma} = i\omega_n + \mu + \sigma h - \Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)$.

El procedimiento de autoconsistencia consiste en resolver de manera iterativa los dos problemas de impureza acoplados hasta alcanzar la convergencia simultánea de las autoenergías y de las funciones de hibridación en ambas subredes.

### 4.2.3. Implementación numérica

El modelo es resuelto para $U = 1{,}7$, valor que sitúa al sistema en el régimen débilmente correlacionado [66]. Se adoptó $t = 0{,}5$ como escala de energía a lo largo de todo este capítulo. Se consideró el caso a llenado mitad, para el cual el potencial químico satisface $\mu = U/2$.

La resolución del problema de impureza en el marco de DMFT se llevó a cabo mediante el método de Monte Carlo de tiempo continuo (CT-QMC, *continuous-time quantum Monte Carlo*) [67]. Este método de resolución constituye una herramienta robusta y versátil que permite calcular con alta precisión las funciones de Green y las autoenergías en el dominio de frecuencias de Matsubara. Las funciones espectrales en el eje real se obtuvieron posteriormente mediante continuación analítica utilizando el método de Máxima Entropía (MaxEnt) [68].

La conductividad de corriente continua (DC) se calculó a partir de la fórmula de Kubo, cuya deducción detallada se presenta en el capítulo 3.

## 4.3. Resultados y discusión

En esta sección se presentan las propiedades magnéticas, de transporte y espectrales obtenidas para el modelo bajo distintas condiciones de temperatura y campo magnético. Se presta especial atención a la MR y a su dependencia con la agitación térmica y la intensidad del campo externo, ya que estos factores proporcionan información clave sobre la transición entre las fases AF aislante y paramagnética (PM) metálica. La MR constituye una sonda particularmente sensible de la competencia entre correlaciones electrónicas y orden magnético, y los resultados aquí mostrados ponen de manifiesto su papel fundamental en la comprensión del comportamiento del sistema.

Con el fin de organizar la discusión, los resultados se dividen en dos partes: la primera dedicada al estudio de la dependencia con la temperatura, y la segunda al análisis de la variación con la intensidad del campo magnético aplicado.

### 4.3.1. Dependencia con la temperatura

Comenzamos analizando los resultados correspondientes a la magnetización de las dos subredes, $m_A$ y $m_B$, en función de la temperatura. Estos resultados se muestran en la Fig. 4.2. Las líneas punteadas representan las curvas de magnetización en ausencia de campo magnético aplicado ($h = 0$). En este caso, la agitación térmica compite con el acoplamiento AF, destruyendo progresivamente el orden magnético al alcanzar la temperatura de Néel $T_N \sim 0{,}092$. Cuando $h \neq 0$, la situación cambia de manera significativa.

La aplicación de un campo magnético externo rompe la simetría de espín entre subredes. A medida que la temperatura aumenta, la magnetización de la subred antiparalela $m_B$ decrece más rápidamente que la de la subred paralela $m_A$. En una temperatura particular, $m_B$ converge con $m_A$, indicando la transición hacia una fase PM con una magnetización neta distinta de cero. Si la intensidad del campo magnético supera un valor crítico $h^*$, el orden AF se suprime por completo y el sistema permanece en un estado PM polarizado en todo el rango de temperaturas. Este comportamiento puede observarse en el caso $h = 0{,}12$ en la Fig. 4.2.

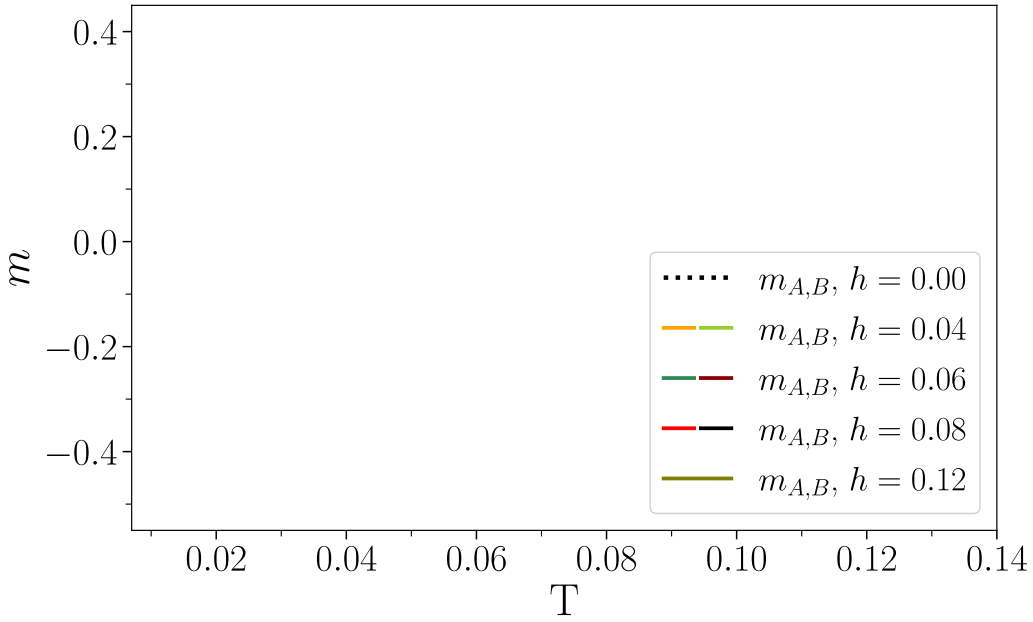


Figura 4.2.: Dependencia con la temperatura de las magnetizaciones $m_A$ y $m_B$ para las subredes $A$ y $B$ bajo distintos valores del campo magnético $h$. Las curvas muestran la supresión del orden AF con el aumento de la temperatura y la alineación asimétrica de los espines debido al campo externo aplicado.

Desde un punto de vista experimental, se ha observado un comportamiento análogo en diversos sistemas fuertemente correlacionados. La frustración parcial del orden AF que reportamos para campos intermedios también ha sido identificada en muestras de $V_2O_3$ [66]. En cuanto a la existencia de un campo crítico capaz de suprimir completamente el orden AF, este fenómeno se ha reportado en compuestos de fermiones pesados como $CePtIn_4$ [69] y $YbRh_2Si_2$ [70], en películas delgadas de $V_5S_8$ [71], y en el rutenato bilaminar Ti-dopado $Ca_3Ru_2O_7$ [61].

La Fig. 4.3 muestra la dependencia con la temperatura de las propiedades de transporte del sistema. En las Figuras 4.3(a) y 4.3(b) se muestran la conductividad $\sigma(T)$ y la resistividad $\rho(T)$, respectivamente. A medida que la temperatura disminuye, el sistema transita desde una fase metálica PM hacia una fase aislante AF. Sin embargo, para campos magnéticos suficientemente intensos, como $h = 0{,}12$, el comportamiento metálico persiste debido a la supresión completa del orden AF. Este resultado pone de manifiesto el papel dominante del orden magnético en la transición metal-aislante del modelo de Hubbard de una banda —un fenómeno también

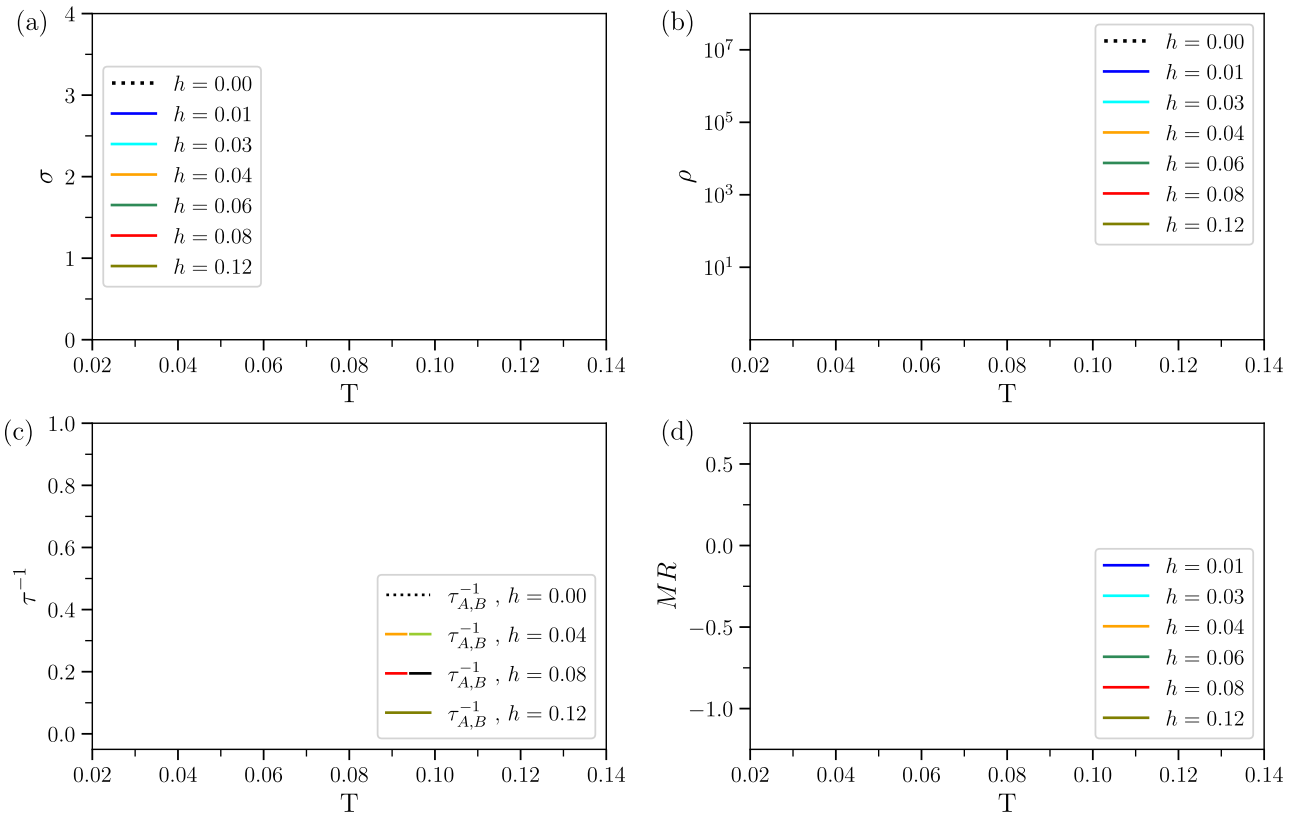


Figura 4.3.: Dependencia con la temperatura de las propiedades de transporte para distintos valores del campo magnético $h$: (a) conductividad $\sigma(T)$, (b) resistividad $\rho(T)$ (escala logarítmica), (c) tasas de dispersión $\tau_A^{-1}$ y $\tau_B^{-1}$, y (d) magnetorresistividad (MR). Los gráficos resaltan el efecto del campo magnético sobre las propiedades de transporte del sistema a lo largo del rango de temperaturas estudiado.

observado experimentalmente en sistemas correlacionados como $V_2O_3$ [66] y en los niquelatos de tierras raras ligeras [72].

Las Figuras 4.3(c) y 4.3(d) muestran las tasas de dispersión (o inversos de los tiempos de vida) $\tau^{-1}$ de las dos subredes y la MR, respectivamente. La tasa de dispersión $\tau^{-1}$ cuantifica la pérdida de coherencia de las cuasipartículas debida a procesos de dispersión [73], con $\tau^{-1} \propto -\Im[G^{-1}(\omega \to 0)]$.

En la Fig. 4.3(c) se observa que las tasas de dispersión aumentan significativamente en la fase AF cuando se aplica un campo magnético distinto de cero. Además, las tasas correspondientes a las dos subredes se separan: la subred $B$ (antiparalela al campo) presenta fluctuaciones más intensas que la subred $A$. Este comportamiento surge de la competencia entre el acoplamiento AF y el campo externo, que induce mayores fluctuaciones cuánticas en la subred antiparalela. Dichas fluctuaciones se ven reforzadas por la agitación térmica. Al descender la temperatura, las tasas de dispersión de ambas subredes decrecen, convergiendo finalmente a cero en la fase aislante. En el régimen metálico PM de altas temperaturas, el campo externo estabiliza el orden magnético y reduce las tasas de dispersión.

Curiosamente, un comportamiento anómalo de transporte asociado a la supresión del orden AF por campo magnético también ha sido reportado en otros modelos correlacionados, como el modelo de Anderson periódico [74], donde se ha demostrado que un fuerte campo de Zeeman puede desestabilizar el orden AF y conducir a una fase metálica no liquido de Fermi con cuasipartículas incoherentes.

Al igual que en los sistemas con MR gigante (GMR), la transición desde una configuración antiparalela a una paralela reduce la resistividad eléctrica. Sin embargo, en nuestro caso, el mecanismo dominante está gobernado por fluctuaciones dependientes de la subred y no por dispersión dependiente del espín. La agitación térmica y el campo magnético externo reconfiguran las magnetizaciones por subred, modificando las trayectorias de dispersión y alterando las propiedades de transporte. En este contexto, la disminución de la resistividad es consecuencia de una transición metal-aislante inducida por el campo externo más que de un mecanismo de dispersión espín-dependiente como es característico de los sistemas GMR.

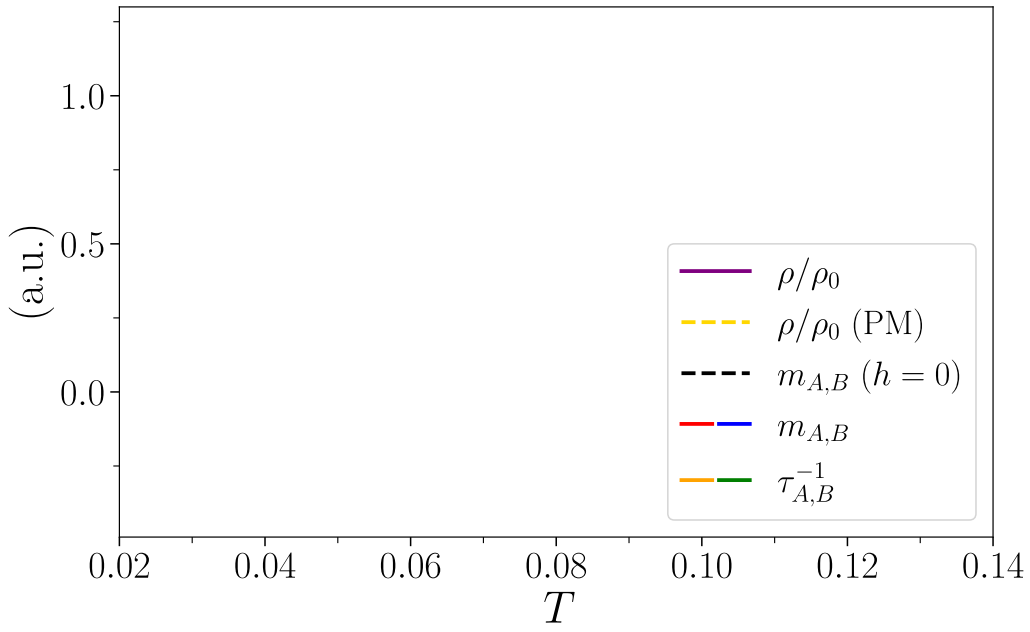


Figura 4.4.: Resistividad normalizada $\rho(h)/\rho(0) = \text{MR}+1$ obtenida para la solución AF completa (línea continua) y para el estado PM forzado (línea discontinua) para $h = 0{,}08$. Se muestran además las magnetizaciones $m_A$ y $m_B$, con y sin campo aplicado, junto con las tasas de dispersión $\tau_A^{-1}$ y $\tau_B^{-1}$. Todas las magnitudes se expresan en unidades arbitrarias (a.u.) para mayor claridad.

La Fig. 4.3(d) ilustra la dependencia de la MR con la temperatura y su habilidad para sensar todas estas características. A altas temperaturas, la MR es positiva y decrece suavemente, en concordancia con el comportamiento esperado en sistemas metálicos no magnéticos. No obstante, al aproximarse a la temperatura de Néel $T_N \sim 0{,}092$, la MR cambia abruptamente de signo y se vuelve negativa. Esta inversión ocurre en el rango de temperaturas donde el sistema permanece en la fase metálica PM debido a la supresión del orden AF por el campo externo —el mismo mecanismo que explica la inversión de signo observada experimentalmente en $V_2O_3$ [66].

A temperaturas aún menores, la MR alcanza un mínimo local en la vecindad de la transición hacia la fase AF aislante. Dicho mínimo marca el inicio del orden magnético, cuando la agitación térmica es lo suficientemente débil como para permitir la estabilización de la fase AF. Por debajo de este punto, la MR aumenta gradualmente debido a la separación de las tasas de dispersión, más pronunciada en la subred antiparalela, lo que provoca un incremento rápido de la resistividad. Finalmente, al reducirse aún más la temperatura, el crecimiento de la MR se desacelera y termina revirtiéndose, disminuyendo nuevamente. Para $h = 0{,}12$, este comportamiento final desaparece: el campo suprime completamente el orden AF y no se produce transición al estado aislante. La Fig. 4.4 muestra este comportamiento para $h = 0{,}08$, comparando $\rho(h)/\rho(0)$ para la solución AF completa y para el estado PM forzado.

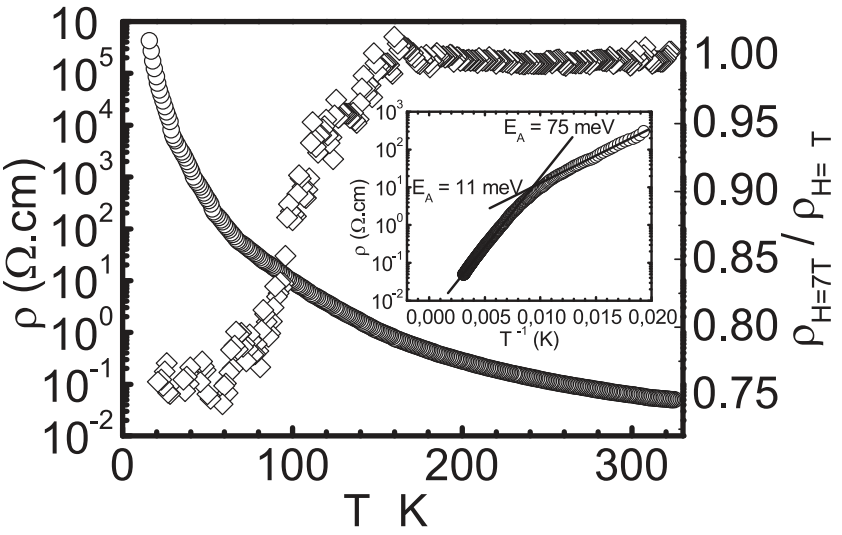


Figura 4.5.: Dependencia con la temperatura de la resistividad eléctrica $\rho$(T) en $PbV_6O_{11}$ en ausencia de campo magnético (eje izquierdo) y de la razón $\rho_{H=7\,\mathrm{T}}/\rho_{H=0}$ (eje derecho), extraída de Ref. [75]. La curva con rombos muestra la evolución térmica de la magnetorresistencia, exhibiendo un cambio de régimen al atravesar la transición magnética FM–PM. Si bien el mecanismo microscópico en este compuesto se ha atribuido a transporte túnel entre defectos estructurales, el perfil funcional de la MR presenta similitudes notables con el comportamiento obtenido en el modelo de Hubbard antiferromagnético.

Un perfil de MR notablemente similar se ha reportado en el vanadato mixto $PbV_6O_{11}$ [75] (véase la Fig. 4.5), aunque en ese caso la transición magnética es de tipo FM–PM y el efecto de MR se atribuye al transporte túnel entre defectos estructurales. Otros sistemas que muestran inversión de signo de la MR con la temperatura incluyen películas de Ge [76], muestras volumétricas de $Nd_{1-x}Sr_xNiO_2$ ($x = 0{,}2, 0{,}4$) [77] y películas delgadas del antiferromagneto $Mn_3Pt$ [78]. Mientras que en los compuestos de Ge y en los niquelatos el origen de la inversión de signo no está completamente dilucidado, en $Mn_3Pt$ se ha asociado con efectos de reorientación de espín. Esta diversidad de comportamientos evidencia la variedad de mecanismos físicos que pueden dar lugar a perfiles similares de MR en sistemas correlacionados.

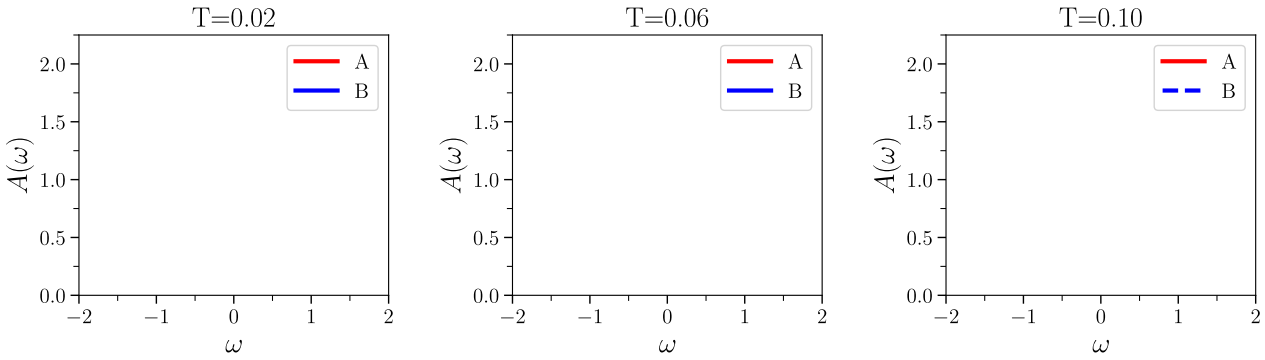


Figura 4.6.: Función espectral $A(\omega)$ en función de la frecuencia real $\omega$ para $h = 0{,}08$, a distintas temperaturas. Las curvas roja y azul representan la evolución del peso espectral correspondiente a las subredes paralela ($A$) y antiparalela ($B$), respectivamente. A medida que la temperatura aumenta, la gap en la subred $B$ (azul) se cierra más rápidamente que en la subred $A$ (roja), reflejando la asimetría inducida por el campo magnético externo.

Para concluir esta subsección, analizamos la evolución con la temperatura de la función espectral $A(\omega)$, mostrada en la Fig. 4.6 para $h = 0{,}08$. A altas temperaturas, ambas subredes exhiben un pico de cuasipartícula en el nivel de Fermi ($\omega = 0$), característico de la fase metálica PM. Al disminuir la temperatura, el campo externo levanta la degeneración entre subredes y se observa la apertura progresiva de un gap de manera asimétrica. En la subred $A$ (paralela al campo), el gap se abre más rápidamente debido a la alineación con la polarización externa, que reduce las fluctuaciones y favorece el orden AF. Por el contrario, la subred $B$ presenta fluctuaciones más intensas y una apertura retardada del gap, resultado de la competencia entre el acoplamiento AF y el campo de Zeeman. A bajas temperaturas, ambos gaps quedan completamente desarrollados, señalando la formación del estado aislante AF. Esta asimetría constituye una firma directa del desbalance de subredes inducido por el campo y resalta la compleja interacción entre orden magnético, fluctuaciones cuánticas y localización electrónica impulsada por correlaciones.

### 4.3.2. Dependencia con la intensidad del campo magnético

A continuación, analizamos el comportamiento del sistema en función de la intensidad del campo magnético externo. Antes de proceder, es importante notar que los valores de $h$ utilizados en nuestras simulaciones son relativamente grandes cuando se expresan en unidades físicas. Por ejemplo, asumiendo una amplitud de salto representativa $t = 0{,}2\,\text{eV}$, un valor $h = 0{,}08$ corresponde a una energía de Zeeman de aproximadamente $0{,}05\,\text{eV}$, lo que equivale a un campo magnético físico de alrededor de $500\,\text{T}$. Este valor supera en al menos un orden de magnitud el rango típico accesible en experimentos de laboratorio. Sin embargo, campos tan intensos resultan útiles en el contexto teórico, ya que permiten resaltar con mayor claridad los mecanismos

subyacentes —tales como la supresión del orden AF, la aparición de asimetrías entre subredes y los cambios resultantes en las propiedades de magnetotransporte.

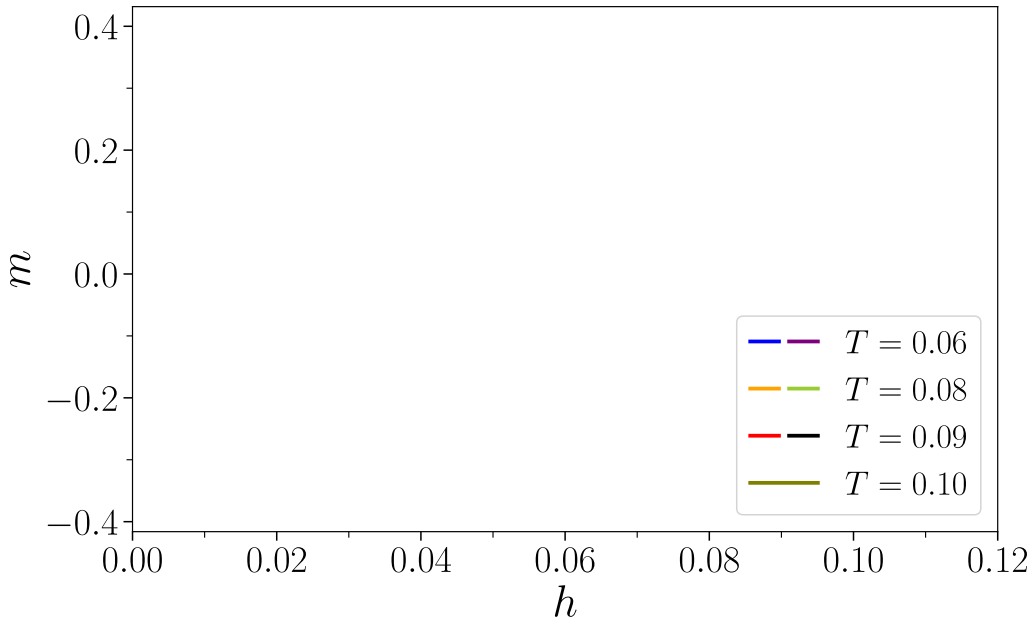


Figura 4.7.: Magnetizaciones $m_A$ (conjunto superior de curvas) y $m_B$ (conjunto inferior) en función del campo magnético $h$ para distintas temperaturas fijas.

Al igual que en el estudio de la temperatura, comenzamos presentando en la Fig. 4.7 los resultados de la magnetización. Para campos magnéticos bajos, el sistema presenta un orden AF bien definido, caracterizado por magnetizaciones casi opuestas en las dos subredes ($m_A \approx -m_B$). A medida que aumenta la intensidad del campo, esta simetría se rompe: la subred paralela ($m_A$) se alinea progresivamente con el campo, mientras que la subred antiparalela ($m_B$) se debilita debido a la competencia entre el acoplamiento AF y la energía de Zeeman. A campos altos, más allá de un valor crítico $h_c$, el orden AF se suprime por completo y el sistema transita hacia un estado PM polarizado. Este valor crítico depende de la temperatura: aumenta al disminuir $T$, cuando el orden AF es más robusto, y disminuye cuando las fluctuaciones térmicas favorecen su supresión. El campo $h^*$ discutido en la subsección anterior corresponde al valor límite de $h_c$ cuando $T \to 0$.

A bajas temperaturas ($T \lesssim 0{,}03$) se observa un comportamiento magnético reminiscente de una transición de primer orden. Mientras que estudios previos reportaron transiciones metamagnéticas dentro de la fase PM —como el salto metal-aislante correlacionado encontrado por Laloux *et al.* [79]— nuestros resultados sugieren que un mecanismo similar de primer orden también puede emerger dentro de la fase AF, impulsado por una supresión abrupta del orden de Néel inducida por el campo. Este aspecto será analizado con mayor detalle en el Capítulo 6.

La Fig. 4.8 presenta la dependencia con el campo magnético de las propiedades de transporte. Las Figuras 4.8(a) y 4.8(b) muestran la conductividad $\sigma(h)$ y la resistividad $\rho(h)$, respectivamente.

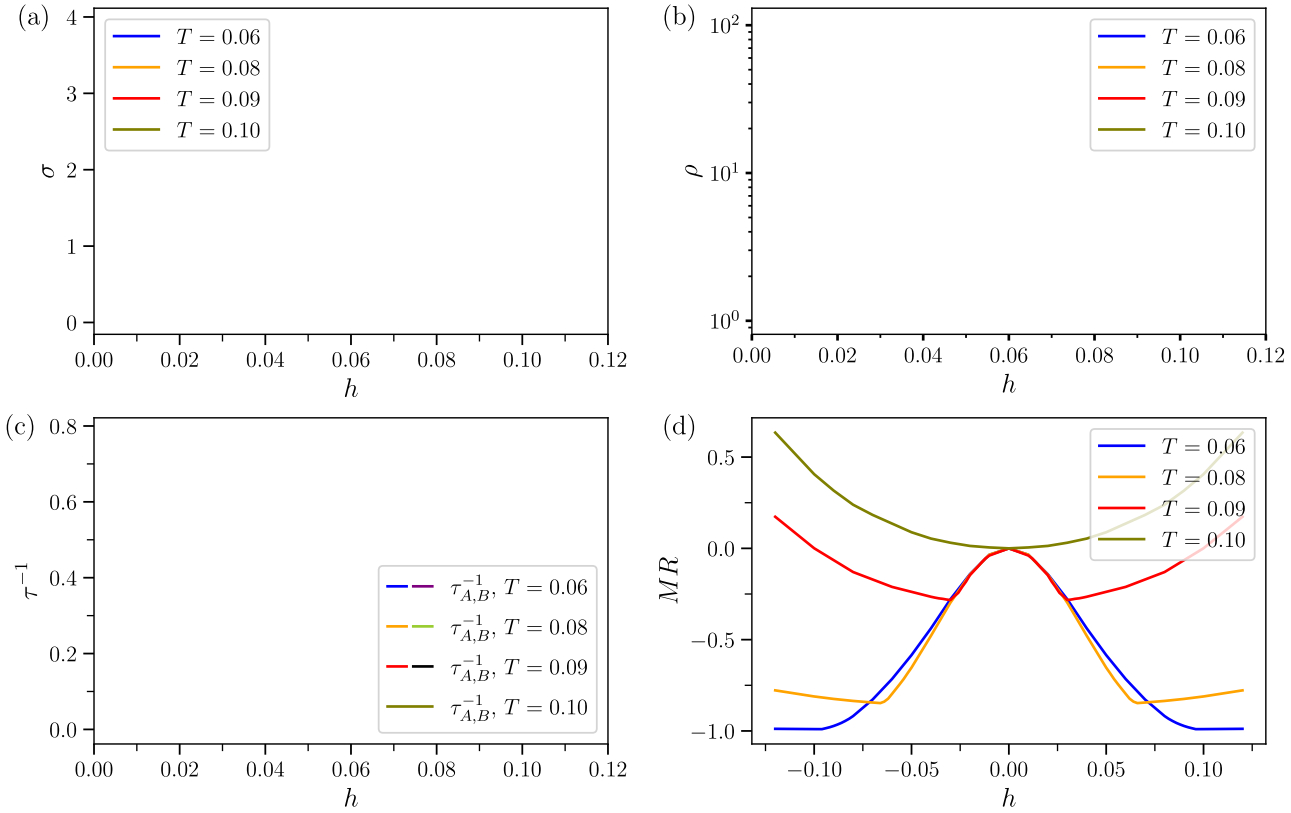


Figura 4.8.: Propiedades de transporte en función de la intensidad del campo magnético $h$ para distintas temperaturas: (a) conductividad $\sigma(h)$, que destaca la transición desde un régimen de mal aislante a un comportamiento metálico a campos altos; (b) resistividad $\rho(h)$, en escala logarítmica, donde el cambio de signo de la derivada indica la transición aislante-meral inducida por el campo; (c) tasas de dispersión $\tau_A^{-1}$ y $\tau_B^{-1}$, que muestran la asimetría entre subredes originada en la competencia entre la energía de Zeeman y las correlaciones AF; (d) MR, que ilustra cómo, a bajos campos, la MR sigue una ley cuadrática $\propto h^2$, pasando de valores negativos a bajas temperaturas a positivos en el régimen de altas temperaturas.

Al aumentar el campo, el sistema evoluciona desde una fase aislante AF hacia una fase metálica PM. A campos bajos, la competencia entre el acoplamiento AF y la energía de Zeeman reduce el gap, aumentando la conductividad y dando lugar a un régimen "mal aislante". A campos altos, la mayor magnetización favorece los efectos de exclusión de Pauli entre electrones conducentes, reduciendo la movilidad y aumentando nuevamente la resistividad.

En la Fig. 4.8(c), las tasas de dispersión reflejan la ruptura de la simetría entre subredes con el incremento del campo. Las fluctuaciones en la subred antiparalela $B$ crecen notablemente en comparación con las de la subred $A$. Esta diferencia se revierte a campos altos, en la fase PM, donde las tasas de dispersión disminuyen debido a la menor movilidad. Por encima de la temperatura de Néel ($T_N \sim 0{,}092$), el comportamiento PM domina en todo el rango de campos, como se ilustra para $T = 0{,}10$.

La Fig. 4.8(d) muestra los resultados para la MR, que presenta una dependencia cuadrática

con el campo. Por encima de $T_N$, la MR es positiva y aumenta con la intensidad de $h$. En la fase PM metálica, los campos más intensos refuerzan el orden magnético, incrementando los efectos de exclusión de Pauli entre los electrones móviles y elevando así la resistividad. Por debajo de $T_N$, a temperaturas intermedias, la MR es inicialmente negativa y decrece con pequeños campos, pero cambia abruptamente de concavidad en torno a los campos críticos $h_c$, volviéndose positiva. Esta variación brusca en la MR se atenúa gradualmente a temperaturas más bajas.

Figura 4.9.: Magnetorresistencia (MR) en función del campo magnético aplicado, $\mu_0 H$, para el aislante topológico antiferromagnético $EuSn_2As_2$ a distintas temperaturas, extraída de Ref. [80]. Para temperaturas por debajo de la temperatura de Néel, $T_N \simeq 24\,\mathrm{K}$, la MR es negativa a campos bajos y cambia de régimen al suprimirse el orden antiferromagnético. Por encima de $T_N$, la MR es positiva en todo el rango de campos. Este comportamiento es cualitativamente consistente con la inversión de signo de la MR asociada a la destrucción del orden AF observada en el modelo de Hubbard antiferromagnético.

Un perfil de MR muy similar se ha reportado en el aislante topológico antiferromagnético $EuSn_2As_2$ [80] (véase la Fig. 4.9). Si bien los mecanismos microscópicos en este material son probablemente más complejos que los descritos por nuestro modelo, las coincidencias son notables: al igual que aquí, la MR es negativa en la fase AF y cambia de signo al suprimirse el orden magnético mediante campo. Para temperaturas por encima de $T_N$, la MR es nuevamente positiva. Estos resultados sugieren que la supresión del orden AF inducida por campo podría constituir un mecanismo genérico para la inversión de signo de la MR en una amplia clase de sistemas correlacionados.

Finalmente, analizamos la evolución del peso espectral en función del campo magnético, mostrada en la Fig. 4.10 para $T = 0{,}06$. A bajos campos, se observa un gap espectral bien definido, consistente con el estado aislante AF. A medida que el campo crece, la energía de Zeeman levanta la degeneración entre subredes, y las fluctuaciones en la subred antiparalela $B$ ensanchan su espectro más rápidamente. Por encima del campo crítico $h_c$, ambas subredes recuperan la simetría característica del régimen PM, y aparece un pico de cuasipartícula en $\omega = 0$, señalando la transición hacia un comportamiento metálico.

Figura 4.10.: Función espectral $A(\omega)$ en función de la frecuencia real $\omega$ para $T = 0{,}06$, y distintos valores de $h$. Las curvas roja y azul representan la evolución del peso espectral correspondiente a las subredes paralela (A) y antiparalela (B), respectivamente. A medida que aumenta $h$, el gap en la subred B (azul) se rellena más rápidamente que en la subred A (roja), reflejando la competencia entre el acoplamiento AF y la energía de Zeeman.

## 4.4. Conclusiones

En este capítulo se estudiaron las propiedades de magnetotransporte del modelo de Hubbard antiferromagnético a llenado mitad bajo la acción de un campo magnético externo, empleando la DMFT de sitio único. El análisis se centró en los mecanismos que originan la MR, haciendo especial énfasis en su dependencia con la temperatura y la intensidad del campo aplicado.

Tanto en nuestro modelo como en los sistemas con magnetorresistencia gigante (GMR), la transición desde una configuración magnética antiparalela hacia una paralela conlleva una reducción de la resistividad. No obstante, mientras que la GMR se origina en la dispersión espín-dependiente que ocurre en las interfaces, en nuestro caso la MR surge de procesos de dispersión dependientes de la subred, donde la resistividad se encuentra estrechamente vinculada a la magnetización local de cada subred más que a los canales de espín individuales. A pesar de esta diferencia fundamental, ambos mecanismos ponen de relieve la influencia decisiva del orden magnético sobre el transporte electrónico y muestran cómo un comportamiento de MR cualitativamente similar puede emerger a partir de orígenes microscópicos distintos.

Nuestros resultados también establecen una conexión sólida con observaciones experimentales en diversos sistemas de electrones correlacionados. Al igual que en el compuesto dopado con titanio $Ca_3Ru_2O_7$ [61], se observa un colapso del gap de Mott impulsado por el campo magnético, producto de la supresión del orden AF. Esta supresión se refleja en la MR como un cambio de signo, fenómeno también registrado en muestras de $V_2O_3$ [66]. Además, identificamos otros sistemas con comportamientos de MR gobernados por mecanismos microscópicos diferentes, pero con perfiles sorprendentemente semejantes. Entre ellos se incluyen los compuestos de fermiones pesados $CePtIn_4$ y $YbRh_2Si_2$ [69, 70], que presentan transiciones dependientes del campo análogas; el vanadato mixto $PbV_6O_{11}$ [75], cuyo perfil de MR comparte la misma

dependencia con la temperatura pese a atravesar una transición FM–PM; y el aislante topológico antiferromagnético $EuSn_2As_2$ [80], cuya respuesta de MR frente al campo magnético guarda una notable similitud con la predicha por nuestro modelo.

Las conclusiones extraídas de este estudio subrayan el papel fundamental de las fluctuaciones inducidas por el campo magnético y de las correlaciones electrónicas en la determinación de la MR en sistemas AF. El modelo analizado —el más simple que captura el orden AF en un entorno electrónico correlacionado— proporciona una base conceptual sólida para comprender el comportamiento de la MR en materiales más complejos. Este trabajo sienta así las bases para futuras extensiones del estudio, tales como la inclusión de interacciones multiorbitales, acoplamiento espín–órbita y efectos topológicos, los cuales se espera que profundicen la comprensión del transporte magnético en sistemas reales. En este sentido, los resultados presentados constituyen un punto de referencia útil para cálculos *ab initio* combinados con DMFT (*band structure + DMFT*) orientados al estudio teórico de compuestos específicos.

Finalmente, cabe señalar que en nuestro análisis se consideró un campo magnético alineado con el eje de Néel. Para pequeñas desviaciones respecto de esta orientación, las características cualitativas de la respuesta de MR se espera que permanezcan robustas, aunque ciertos aspectos cuantitativos —como las temperaturas críticas o los valores umbral del campo— podrían variar. En cambio, un campo estrictamente perpendicular generaría componentes de magnetización transversal y canteo de espines [81], lo que requeriría un esquema de autoconsistencia más general, con funciones de hibridación no diagonales. Dichas configuraciones plantean desafíos técnicos para la DMFT y representan un tema de investigación atractivo para estudios futuros.

# 5. Espintrónica en el modelo de Hubbard antiferromagnético

En este capítulo abordamos el estudio de las propiedades de magnetotransporte del modelo de Hubbard antiferromagnético en presencia de un campo magnético externo y fuera de llenado mitad, extendiendo los resultados expuestos en el Capítulo 4. La ruptura de la simetría partícula–hueco introducida por el dopaje, combinada con la pérdida de equivalencia entre subredes asociada al orden de Néel bajo la acción del campo aplicado, altera de manera no trivial la respuesta del sistema, dando lugar a la emergencia de corrientes de carga polarizadas en espín. Analizaremos en detalle el mecanismo responsable de esta polarización y estudiaremos posteriormente la evolución del sistema tanto a temperatura fija como a campo externo fijo, revelando un rico paisaje de transporte espín-dependiente en antiferromagnetos correlacionados.

## 5.1. Antiferromagnetos como plataforma emergente en espintrónica

La espintrónica, también conocida como electrónica basada en el espín o electrónica de transporte de espín, explota el control activo del espín del electrón además de su carga en sistemas de estado sólido [82, 83]. Este grado de libertad adicional permite manipular corrientes eléctricas a menores voltajes de operación. Como consecuencia, los dispositivos espintrónicos ofrecen menor consumo energético, mayores velocidades de operación y mayor densidad de almacenamiento de información en comparación con los dispositivos electrónicos convencionales basados exclusivamente en la carga [83].

Los ferromagnetos (FMs) han desempeñado un papel central en el desarrollo de la espintrónica. Avances tempranos —como el tunelamiento polarizado en espín en uniones ferromagnéticas y la realización de ferromagnetos medio-metálicos— los consolidaron como la piedra angular de los dispositivos espintrónicos [82, 83]. Debido a la ruptura de la simetría de reversión temporal, los FMs presentan bandas electrónicas escindidas en espín y magnetización espontánea, lo que facilita la manipulación y detección del orden magnético. Sin embargo, esta magnetización neta impone limitaciones intrínsecas, entre ellas la restricción en la densidad de integración debido a

campos de dispersión (stray fields), la susceptibilidad a perturbaciones magnéticas externas y límites en la velocidad de operación asociados a dinámicas magnetizacionales en el rango de GHz [84, 85].

Los antiferromagnetos convencionales (AFMs), caracterizados por subredes magnéticas completamente compensadas, evitan naturalmente muchas de estas desventajas. Entre sus ventajas intrínsecas frente a los sistemas ferromagnéticos se encuentran la insensibilidad a campos magnéticos externos, dinámicas de espín ultrarrápidas y el potencial para alcanzar mayores densidades de integración en dispositivos [84,85]. Además, los materiales antiferromagnéticos son abundantes y diversos, incluyendo aislantes, semiconductores, metales e incluso superconductores [84].

No obstante, a pesar de estas propiedades atractivas, los AFMs colineales convencionales —compuestos por dos subredes magnéticas con momentos antiparalelos y sin ruptura adicional de simetría local— presentan bandas electrónicas degeneradas en espín como consecuencia de la simetría combinada de inversión espacial y reversión temporal (PT). En consecuencia, carecen de polarización intrínseca de la estructura electrónica [84]. Esta restricción de simetría suprime fenómenos de transporte anómalo y polarizado en espín, relegando históricamente a los AFMs a un rol pasivo en las primeras arquitecturas espintrónicas [85].

Este paradigma ha sido recientemente transformado por el descubrimiento de antiferromagnetos con polarización de espín, que pueden clasificarse en tres grandes familias según sus mecanismos distintivos de ruptura de la simetría PT: altermagnetos (AMs), antiferromagnetos no colineales (ncl-AFMs) y antiferromagnetos polarizados por capa en dos dimensiones (LP-AFMs) [84, 85]. En los AMs, las subredes de espines antiparalelos se conectan mediante simetrías cristalinas de rotación, en lugar de traslaciones de red o inversión espacial, como ocurre en los AFMs convencionales [84, 85]. Los AFMs no colineales suelen presentar arreglos triangulares o tipo kagome, generando texturas de espín quirales que rompen la simetría PT e inducen efectos anómalos asociados a curvatura de Berry [84, 85]. Finalmente, los LP-AFMs explotan gradientes de potencial entre capas en materiales bidimensionales o heteroestructuras para romper la simetría PT, permitiendo una polarización de espín selectiva por capa que puede ser ajustada mediante campos eléctricos externos, configuraciones de apilamiento o ferroelectricidad deslizante. Una representación esquemática de estas tres familias y de los principales fenómenos de transporte asociados se muestra en la Fig. 5.1.

A medida que la variedad de AFMs con polarización de espín continúa expandiéndose, resulta cada vez más importante desarrollar una comprensión teórica unificada de los mecanismos que gobiernan sus propiedades de transporte. A diferencia de los escenarios basados en simetrías cristalinas específicas o en texturas magnéticas no colineales, en este capítulo mostraremos que un mecanismo intrínsicamente correlacionado puede emerger incluso en un antiferromagneto colineal convencional. En particular, analizaremos el antiferromagneto de Mott–Hubbard sometido a un campo magnético externo [12, 29]. Cuando el modelo se dopa fuera de llenado mitad se rompe la

Figura 5.1.: Clasificación esquemática de antiferromagnetos con polarización de espín según el mecanismo de ruptura de la simetría combinada inversión–reversión temporal (PT), adaptado de Ref. [85]. Se muestran tres familias principales: (i) altermagnetos (AMs), donde subredes antiparalelas están relacionadas por simetrías cristalinas de rotación, dando lugar a desdoblamiento de bandas dependiente del momento; (ii) antiferromagnetos no colineales (ncl-AFMs), cuyas texturas de espín quirales generan curvatura de Berry finita y efectos de transporte anómalo; y (iii) antiferromagnetos polarizados por capa (LP-AFMs), en los que una diferencia de potencial entre capas rompe la equivalencia interlaminar, habilitando polarización de espín selectiva por capa. Los iconos ilustran fenómenos asociados tales como efecto Hall anómalo, efecto Nernst anómalo, respuestas magneto–ópticas y torques inducidos por corrientes.

simetría partícula–hueco (PH); la aplicación de un campo magnético externo, a su vez, elimina la equivalencia entre subredes protegida por la simetría combinada PT. La acción conjunta de estos efectos da lugar a una polarización no trivial de las corrientes de espín, ofreciendo a los antiferromagnetos colineales estructuralmente convencionales una ruta alternativa hacia aplicaciones espintrónicas.

## 5.2. Modelo e implementación numérica

Estudiamos el modelo de Hubbard de una banda sobre una red bipartita en presencia de un campo magnético uniforme tipo Zeeman $h$, cuyo Hamiltoniano es

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left( a^{\dagger}_{i\sigma} b_{j\sigma} + b^{\dagger}_{i\sigma} a_{j\sigma} \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} - h \sum_{i} S^{z}_{i}, \tag{5.1}$$

donde $a^{\dagger}_{i\sigma}$ ($b^{\dagger}_{i\sigma}$) crea un electrón con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$ en la subred $A$ ($B$), $U$ es la repulsión local de Coulomb y $\mu$ fija el llenado. Nos concentramos en el régimen dopado con electrones, variando el potencial químico $\mu > U/2$ para alejarnos del llenado mitad, y consideramos la red hipercúbica en el límite de dimensión infinita, para la cual la densidad de estados no interactuante es gaussiana y la teoría de campo medio dinámico (DMFT) resulta exacta.

Para describir el orden antiferromagnético colineal en la estructura bipartita, resolvemos el modelo dentro de DMFT de sitio único introduciendo dos problemas de impureza acoplados, uno por cada subred, tal como se explica en el Capítulo 4 [29]. La solución auto-consistente permite obtener autoenergías locales resueltas en subred y espín, $\Sigma_{\alpha\sigma}(i\omega_n)$, con $\alpha = A, B$ y $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Los problemas de impureza se resuelven mediante el método de Monte Carlo cuántico de tiempo continuo (CT-QMC) [67], y las funciones espectrales en frecuencia real $A^{\alpha\beta}_{\sigma}(\omega)$ se obtienen por continuación analítica mediante el método de máxima entropía (MaxEnt) [68].

A lo largo de este capítulo fijamos el salto electrónico en $t = 0{,}5$, que define la unidad de energía, y tomamos $U = 1{,}7$, ubicando al sistema en el régimen de acoplamiento intermedio. Para evitar efectos asociados al metamagnetismo [29, 86], trabajamos a una temperatura intermedia $T = 0{,}05$, aproximadamente el 50 % de la temperatura de Néel ($T_N = 0{,}092$), y variamos la intensidad del campo magnético aplicado $h$. Posteriormente, con el propósito de estudiar los efectos térmicos sobre las propiedades de transporte, fijamos el campo en un valor intermedio $h = 0{,}04$, lo que permite explorar la competencia entre el orden antiferromagnético y la polarización inducida por el campo sin saturar la respuesta magnética del sistema.

La conductividad DC resuelta en espín, $\sigma_{\sigma}$, se calcula a partir de la expresión de Kubo para la red hipercúbica en el límite de dimensión infinita, derivada en el Capítulo 3 (véase Ec. (3.73)) [29, 60],

$$\sigma_{\sigma} = \sigma_0 \int \frac{d\omega}{2\pi} \int d\varepsilon \left( -\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega} \right) \rho(\varepsilon) \left[ A^{AA}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) A^{BB}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) + \left( A^{AB}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) \right)^2 \right], \tag{5.2}$$

donde $\sigma_0$ es una constante dimensional, $f(\omega)$ es la distribución de Fermi–Dirac, $\rho(\varepsilon)$ es la densidad de estados no interactuante y $A^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, \omega)$ son las funciones espectrales interactuantes resueltas en espín y subred.

## 5.3. Implicaciones de la simetría partícula–hueco

La comprensión del mecanismo que conduce a la polarización de las corrientes de carga en el modelo de Hubbard antiferromagnético requiere analizar cuidadosamente sus propiedades de simetría. En particular, veremos que a llenado mitad existen relaciones exactas entre funciones de Green y funciones espectrales que imponen una compensación perfecta entre canales de espín en la respuesta de transporte, aún en presencia de un campo magnético externo.

### 5.3.1. Simetría partícula–hueco pura

En una red bipartita compuesta por dos subredes $A$ y $B$, la transformación de partícula–hueco (PH) se define como,

$$c_{i\sigma} \longrightarrow \eta_i \, c_{i\sigma}^{\dagger}, \qquad \eta_i = \begin{cases} +1, & i \in A, \\ -1, & i \in B. \end{cases} \tag{5.3}$$

A llenado mitad ($\mu = U/2$) y en ausencia de campo magnético externo, el Hamiltoniano de Hubbard es invariante bajo esta transformación [87]. Bajo PH, los operadores de densidad locales transforman como,

$$n_{i\sigma} \longrightarrow 1 - n_{i\sigma}, \tag{5.4}$$

lo que garantiza la invariancia del término de interacción y del término químico cuando $\mu = U/2$.

Sin embargo, la inclusión de un campo magnético uniforme mediante el término de Zeeman,

$$-h \sum_i S_i^z = -\frac{h}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \tag{5.5}$$

rompe explícitamente la simetría PH. En efecto, bajo la transformación (5.3),

$$S_i^z = \tfrac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \longrightarrow -S_i^z, \tag{5.6}$$

cambiando de signo. En consecuencia, en presencia de un campo magnético externo el modelo ya no posee la simetría PH pura, incluso a llenado mitad.

### 5.3.2. Simetría combinada partícula–hueco e inversión de espín (PHsp)

Aunque la simetría PH pura se pierde cuando $h \neq 0$, el modelo bipartito a llenado mitad conserva una simetría exacta más general, consistente en la combinación de conjugación partícula–hueco e inversión de espín. Denotaremos esta transformación como PHsp.

Su acción sobre los operadores fermiónicos es,

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &\longrightarrow \eta_i \, c^{\dagger}_{i\downarrow}, \\ c_{i\downarrow} &\longrightarrow -\eta_i \, c^{\dagger}_{i\uparrow}, \end{aligned} \tag{5.7}$$

donde el signo relativo asegura la conservación de las relaciones de anticonmutación.

Bajo PHsp,

$$n_{i\uparrow} \longrightarrow 1 - n_{i\downarrow}, \qquad n_{i\downarrow} \longrightarrow 1 - n_{i\uparrow}, \tag{5.8}$$

de modo que la polarización local de espín transforma como,

$$S^z_i = \tfrac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \longrightarrow S^z_i. \tag{5.9}$$

Esto implica que el término de Zeeman permanece invariante. Junto con la condición $\mu = U/2$, se concluye que PHsp es una simetría exacta del modelo de Hubbard a llenado mitad incluso en presencia de un campo magnético uniforme.

### 5.3.3. Consecuencias para funciones de Green y funciones espectrales

La existencia de esta simetría tiene consecuencias directas sobre las funciones de Green retardadas resueltas en subred y espín,

$$G^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ c_{\alpha\sigma}(\varepsilon, t), c^{\dagger}_{\beta\sigma}(\varepsilon, 0) \right\} \right\rangle, \tag{5.10}$$

con $\alpha, \beta = A, B$. A llenado mitad, el promedio térmico es invariante bajo PHsp. Aplicando la transformación (5.7) y utilizando las propiedades del anticonmutador, se obtiene la relación exacta,

$$G^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) = -\,\eta_\alpha \eta_\beta \left[ G^{\alpha\beta}_{\bar{\sigma}}(\varepsilon, -\omega) \right]^{*}. \tag{5.11}$$

Definiendo las funciones espectrales como,

$$A^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, \omega), \tag{5.12}$$

se obtiene la relación central,

$$A^{\alpha\beta}_{\sigma}(\varepsilon, \omega) = \eta_\alpha \eta_\beta \, A^{\alpha\beta}_{\bar{\sigma}}(\varepsilon, -\omega). \tag{5.13}$$

En particular, esta relación implica que,

$$A^{AA}_{\uparrow}(\varepsilon, \omega) = A^{AA}_{\downarrow}(\varepsilon, -\omega), \quad A^{BB}_{\uparrow}(\varepsilon, \omega) = A^{BB}_{\downarrow}(\varepsilon, -\omega), \quad A^{AB}_{\uparrow}(\varepsilon, \omega) = -A^{AB}_{\downarrow}(\varepsilon, -\omega). \tag{5.14}$$

Estas relaciones son exactas a llenado mitad y cómo veremos a continuación constituyen la base microscópica de la compensación perfecta entre canales de espín en la conductividad DC.

A partir de este punto, emplearemos la notación PH en sentido amplio para englobar tanto la simetría partícula–hueco pura como su extensión PHsp en presencia de campo magnético. Desde el punto de vista estructural, ambas imponen las mismas restricciones sobre las funciones de Green y las funciones espectrales a llenado mitad, y por lo tanto conducen a idénticas consecuencias para la respuesta de transporte.

## 5.4. Ruptura de simetrías y polarización de la conductividad DC

La Fig. 5.2 muestra las funciones espectrales resueltas en energía de banda y frecuencia en los cuatro regímenes relevantes del modelo. Estos mapas $A_\sigma^{\alpha\beta}(\varepsilon,\omega)$ contienen la información completa que ingresa en la expresión de Kubo para la conductividad DC Ec. (5.2),

$$\sigma_\sigma = \sigma_0 \int \frac{d\omega}{2\pi} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f(\omega)}{\partial \omega}\right) \rho(\varepsilon) \left[A_\sigma^{AA}(\varepsilon,\omega) A_\sigma^{BB}(\varepsilon,\omega) + \left(A_\sigma^{AB}(\varepsilon,\omega)\right)^2\right],$$

y permiten visualizar de manera directa cómo las simetrías del modelo restringen la polarización de la respuesta de transporte.

A llenado mitad y en ausencia de campo magnético, el estado antiferromagnético (AFM) está caracterizado por la acción combinada de la simetría PH y la equivalencia entre subredes protegida por la simetría PT. Ambas simetrías imponen las siguientes relaciones exactas entre las funciones espectrales,

$$A_\uparrow^{AA}(\varepsilon,\omega) = A_\downarrow^{BB}(\varepsilon,\omega) = A_\downarrow^{AA}(\varepsilon,-\omega) = A_\uparrow^{BB}(\varepsilon,-\omega), \qquad A_\uparrow^{AB}(\varepsilon,\omega) = A_\downarrow^{AB}(\varepsilon,\omega).$$

Como consecuencia, las contribuciones resueltas en espín a la conductividad DC de Kubo permanecen estrictamente iguales tras la integración en energía y frecuencia, resultando en transporte degenerado en espín.

Al dopar el sistema a campo nulo se rompe la simetría PH y emergen procesos de dispersión fuertemente dependientes del espín, lo cual se manifiesta en una redistribución asimétrica del peso espectral alrededor del nivel de Fermi ($\omega = 0$). Sin embargo, la equivalencia entre las dos subredes AFMs, protegida por la simetría $PT$, permanece intacta. En términos espectrales esto implica,

$$A_\uparrow^{AA}(\varepsilon,\omega) = A_\downarrow^{BB}(\varepsilon,\omega), \quad A_\downarrow^{AA}(\varepsilon,\omega) = A_\uparrow^{BB}(\varepsilon,\omega), \quad A_\uparrow^{AB}(\varepsilon,\omega) = A_\downarrow^{AB}(\varepsilon,\omega)$$

Figura 5.2.: Mapas espectrales $A_\sigma^{\alpha\beta}(\varepsilon, \omega)$ para los cuatro regímenes relevantes del modelo. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo: llenado mitad sin campo magnético ($h = 0$, $\delta = 0$), sistema dopado a campo nulo ($h = 0$, $\delta \neq 0$), llenado mitad con campo magnético ($h \neq 0$, $\delta = 0$), y sistema dopado en presencia de campo ($h \neq 0$, $\delta \neq 0$). Sólo la acción combinada del dopaje y del campo magnético elimina completamente las simetrías espectrales que imponen transporte degenerado en espín. Los valores para el campo aplicado y el dopaje considerados son $h = 0{,}07$ y $\delta = 0{,}028$.

Esta simetría residual continúa imponiendo una compensación exacta entre los canales de espín en la expresión para la conductividad, impidiendo la aparición de una polarización neta de corriente.

En contraste, la aplicación de un campo magnético a llenado mitad levanta la equivalencia dinámica entre las subredes AFMs y genera espectros dependientes de la subred, tal como puede verificarse visualmente en los mapas de la Fig. 5.2. No obstante, la simetría PH generalizada impone en cada subred las relaciones,

$$A_\uparrow^{AA}(\varepsilon, \omega) = A_\downarrow^{AA}(\varepsilon, -\omega), \quad A_\uparrow^{BB}(\varepsilon, \omega) = A_\downarrow^{BB}(\varepsilon, -\omega), \quad A_\uparrow^{AB}(\varepsilon, \omega) = -A_\downarrow^{AB}(\varepsilon, -\omega),$$

Dado que la derivada de la distribución de Fermi–Dirac que aparece en el kernel de Kubo, $-\partial_\omega f(\omega)$, es una función par de la frecuencia, las contribuciones resueltas en espín a la conductividad DC permanecen exactamente idénticas tras la integración. En consecuencia, la respuesta

de transporte DC sigue siendo degenerada en espín a pesar de la ruptura explícita de la simetría $PT$.

Sólo cuando el dopaje y el campo magnético están presentes simultáneamente se eliminan tanto la simetría PH como la equivalencia entre subredes antiferromagnéticas asociada a $PT$. En este régimen desaparecen todas las restricciones espectrales que vinculan espines opuestos y subredes complementarias. Como resultado, las contribuciones resueltas en espín a la conductividad dejan de ser degeneradas y emerge una polarización finita de la corriente de carga.

La Fig. 5.3 ilustra cómo las consideraciones de simetría discutidas anteriormente se reflejan directamente en la respuesta de transporte DC. El panel izquierdo muestra las conductividades DC resueltas en espín en función del dopaje para distintos valores del campo magnético aplicado. A campo nulo, las conductividades permanecen estrictamente degeneradas para todos los dopajes considerados, es decir, $\sigma_\uparrow = \sigma_\downarrow$. Este resultado confirma que la ruptura de la simetría PH por sí sola no es suficiente para generar una corriente de carga polarizada.

Al aplicar un campo magnético, las conductividades resueltas en espín se separan y adquieren una marcada dependencia tanto con la intensidad del campo como con el dopaje. La polarización resultante de la corriente,

$$P = \frac{\sigma_\uparrow - \sigma_\downarrow}{\sigma_\uparrow + \sigma_\downarrow},$$

se muestra en el panel derecho. Una polarización finita emerge únicamente cuando están presentes simultáneamente el dopaje y el campo magnético, es decir, cuando se rompen al mismo tiempo la simetría PH y la equivalencia entre subredes protegida por la simetría $PT$.

Para dopajes más grandes, las conductividades exhiben un cambio claro en la pendiente, señalando la supresión del orden AFM de largo alcance y el cruce hacia un metal paramagnético (PM) polarizado por el campo. De manera notable, la polarización de la corriente persiste a través de este cruce, demostrando que la misma es impulsada por las correlaciones electrónicas que emergen al dopar fuera del llenado mitad en combinación con la ruptura de inversión temporal inducida por el campo magnético aplicado, y no simplemente por el orden AFM estático.

Desde una perspectiva más amplia, el mecanismo aquí identificado presenta una estrecha analogía, a nivel de simetría y de respuesta de transporte, con el recientemente propuesto en materiales altermagnéticos (AMs). En los AMs, bandas electrónicas y corrientes polarizadas en espín emergen en antiferromagnetos colineales sin magnetización neta como consecuencia de la ruptura de la simetría combinada inversión–reversión temporal ($PT$) inducida por la estructura cristalina. De manera análoga, el transporte polarizado en espín reportado en esta tesis se origina en la ruptura combinada de la simetría PH y de la reversión temporal. En este sentido, el modelo de Hubbard AFM dopado constituye un análogo correlacionado de la espintrónica

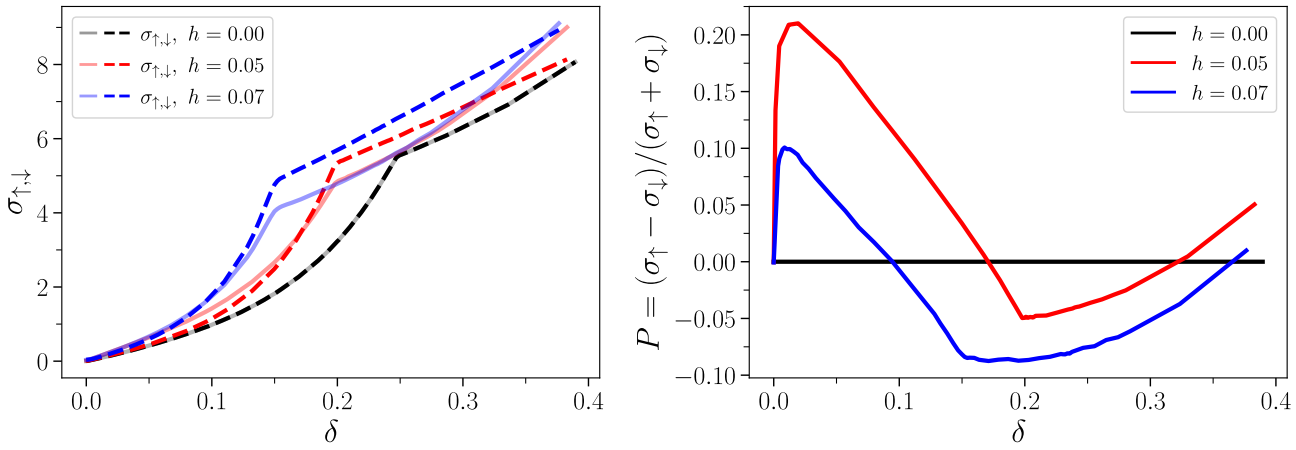


Figura 5.3.: Conductividad DC resuelta en espín (izquierda) y polarización de la corriente $P = (\sigma_\uparrow - \sigma_\downarrow)/(\sigma_\uparrow + \sigma_\downarrow)$ (derecha) como función del dopaje $\delta$ para distintos valores del campo magnético aplicado. Una polarización finita de la corriente emerge únicamente cuando se rompen simultáneamente la simetría partícula–hueco (dopaje finito) y la equivalencia entre subredes asociada a la simetría PT (campo magnético). El cambio de pendiente en las conductividades a dopajes intermedios señala la supresión del orden antiferromagnético y el cruce hacia un régimen metálico paramagnético, donde la polarización de corriente persiste.

altermagnética, demostrando que el transporte de carga polarizado en espín puede emerger a partir de principios universales de ruptura de simetría incluso en antiferromagnetos colineales estructuralmente convencionales.

En síntesis, la emergencia de transporte de carga polarizado en espín en el modelo de Hubbard antiferromagnético dopado no es un efecto accidental ni dependiente de detalles microscópicos específicos, sino la consecuencia directa de la ruptura simultánea de dos restricciones de simetría independientes. En las secciones siguientes analizaremos cómo esta polarización puede ser controlada sistemáticamente mediante la intensidad del campo magnético y la temperatura.

## 5.5. Dependencia con el dopaje y la intensidad de campo magnético

Comenzamos analizando la Fig. 5.4, donde se muestra la evolución de la magnetización (panel izquierdo) y de las ocupaciones resueltas en espín (panel derecho) en función del dopaje electrónico $\delta$, para distintos valores del campo magnético aplicado $h$, a temperatura fija $T = 0{,}05$.

En ausencia de campo ($h = 0$), el sistema presenta orden antiferromagnético (AFM) colineal de tipo Néel, caracterizado por magnetizaciones opuestas en ambas subredes ($m_A = -m_B$). La magnitud del momento escalonado ($m_A - m_B$) decrece de manera continua al aumentar el dopaje y el estado AFM persiste hasta un dopaje crítico $\delta_c \simeq 0{,}25$, a partir del cual las magnetizaciones convergen a cero y el sistema cruza hacia una fase paramagnética (PM).

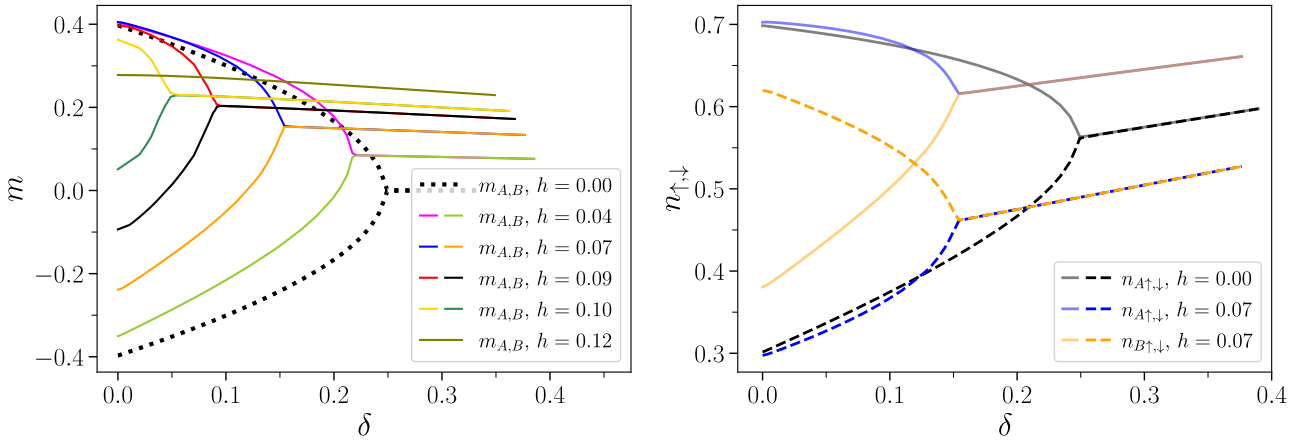


Figura 5.4.: Magnetizaciones resueltas por subred (panel izquierdo) y ocupaciones resueltas por espín (panel derecho) en función del dopaje electrónico $\delta$, para distintos valores del campo magnético $h$, a temperatura fija $T = 0{,}05$. El incremento de $h$ debilita el orden de Néel al mismo tiempo que intensifica el desbalance de espín entre subredes inducido por el dopaje.

Al aplicar un campo externo, el cruce AFM→PM se desplaza sistemáticamente hacia valores menores de dopaje. El campo Zeeman favorece configuraciones con espines alineados globalmente, compitiendo con el acoplamiento antiferromagnético entre subredes y debilitando el momento escalonado. En consecuencia, la equivalencia dinámica entre subredes se rompe progresivamente, lo cual se manifiesta en la asimetría creciente entre $m_A(\delta)$ y $m_B(\delta)$ para $h \neq 0$. Para campos suficientemente intensos, el orden AFM se suprime por completo y el sistema permanece en un estado PM polarizado, como se observa claramente para $h = 0{,}12$.

El panel derecho de la Fig. 5.4 muestra la evolución de las ocupaciones resueltas en espín. A campo nulo, la simetría de Néel (equivalencia subred–espín) impone la relación $n_{B\sigma} = n_{A\bar{\sigma}}$, por lo que basta con mostrar $n_{A\uparrow}$ y $n_{A\downarrow}$ para caracterizar el estado (curvas negras). A llenado mitad, el canal ↑ está inicialmente favorecido en la subred $A$, consistente con la estructura AFM. Al aumentar el dopaje electrónico, $n_{A\uparrow}$ decrece gradualmente mientras que $n_{A\downarrow}$ crece con mayor rapidez. Esta redistribución refleja que el sistema comienza a poblar estados con la orientación de espín previamente desfavorecida en cada subred (espín ↓ en $A$ y, de manera equivalente, espín ↑ en $B$), lo cual suaviza la alternancia magnética característica del orden de Néel. A dopajes suficientemente grandes, las ocupaciones resueltas en espín convergen, señalando el establecimiento de un estado PM homogéneo.

Al aplicar un campo Zeeman finito, la equivalencia entre subredes se rompe explícitamente y la simetría $PT$ deja de ser exacta. El campo introduce un sesgo global que favorece los estados alineados, compitiendo con la estructura alternante del orden AFM y promoviendo una polarización uniforme. Como en el caso $h = 0$, cada subred comienza a poblar orientaciones de espín que antes estaban energéticamente penalizadas; sin embargo, ahora este reacomodamiento ocurre a dopajes menores y conduce finalmente a una fase PM polarizada, con magnetización

neta finita. Esta tendencia se aprecia claramente en las curvas de ocupación para $h = 0{,}07$ en el panel derecho de la Fig. 5.4.

La asimetría observada en las ocupaciones resueltas en espín se refleja directamente en el comportamiento de las tasas de dispersión, o inversos de los tiempos de vida, $\tau_{\alpha\sigma}^{-1}$. Tal como se observa en el panel izquierdo de la Fig. 5.5, la componente de espín dominante en cada subred —que es a su vez la que muestra mayor deslocalización— exhibe también fluctuaciones locales más intensas.

Este efecto está ausente a llenado mitad, donde la condición de ocupación total igual en cada subred (simetría PH) impone un balance exacto entre los canales de espín, suprimiendo cualquier desbalance en las tasas de dispersión (tal como se discutió en el Capítulo 4 [29]). El dopaje rompe este equilibrio local, habilitando canales de dispersión dependientes del espín incluso en ausencia de magnetización neta.

Para el caso sin campo ($h = 0$), sólo se muestran $\tau_{A\uparrow}^{-1}$ y $\tau_{A\downarrow}^{-1}$, ya que las componentes de la subred complementaria se obtienen por simetría de Néel. En este régimen, aunque las tasas de dispersión se vuelven fuertemente dependientes del dopaje, la equivalencia subred–espín (simetría PT) garantiza que su contribución al transporte permanece compensada entre canales.

Cuando se aplica un campo Zeeman finito, la equivalencia entre subredes se rompe explícitamente. En el régimen de bajo dopaje, la subred antiparalela al campo presenta fluctuaciones más intensas y, por lo tanto, mayores tasas de dispersión. A dopajes elevados, donde el orden AFM de largo alcance ha colapsado, el sistema entra en un estado PM polarizado en el cual la simetría entre subredes se restaura efectivamente. En este régimen, el componente de espín antiparalelo al campo (espín $\downarrow$) muestra una dispersión más intensa, reflejando la competencia entre la polarización inducida por el campo aplicado y las correlaciones antiferromagnéticas residuales. Para campos suficientemente intensos, como $h = 0{,}12$, donde el orden AFM está completamente suprimido, este comportamiento se extiende a lo largo de todo el rango de dopajes.

El panel derecho de la Fig. 5.5 muestra la polarización $P$ de la conductividad DC, en función del dopaje para todos los valores de campo magnético considerados en este estudio. A diferencia del gráfico presentado en la sección anterior, donde se comparaban sólo algunos valores representativos de $h$, aquí se exhibe la evolución completa de la polarización al recorrer sistemáticamente la intensidad del campo aplicado.

Se observa que la polarización alcanza sus valores máximos para valores relativamente pequeños de dopaje y de campo aplicado, cuando aún el orden AFM es robusto. En esta ventana de párametros, la simetría partícula–hueco se ve rota por efecto del dopaje, y el campo magnético es lo suficientemente intenso como para romper la equivalencia entre subredes, pero no tan grande como para destruir completamente las correlaciones AFM que amplifican las asimetrías dinámicas.

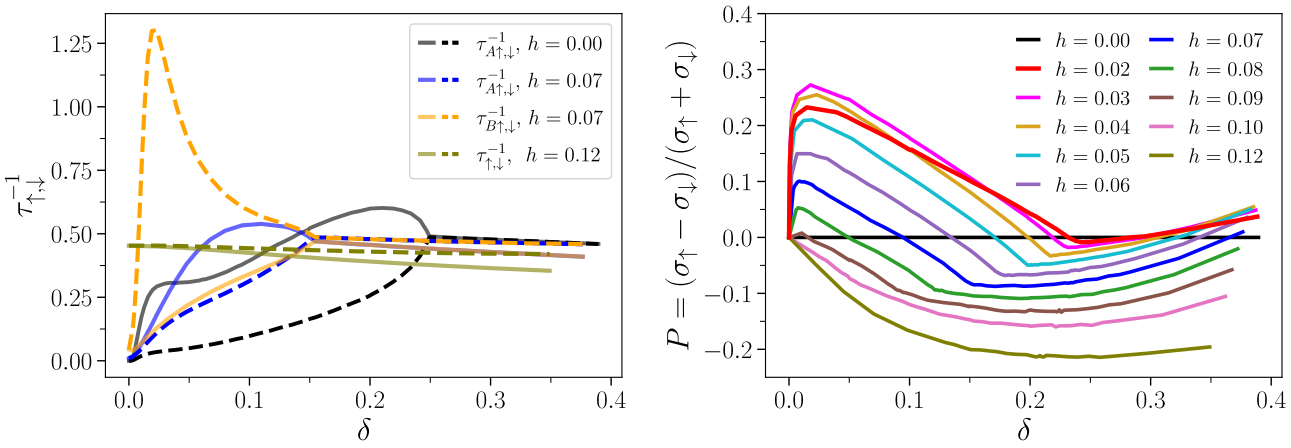


Figura 5.5.: Panel izquierdo: Tasas de dispersión (inversos de los tiempos de vida) $\tau^{-1}_{\alpha\sigma}$ en función del dopaje $\delta$, para tres valores representativos del campo magnético $h =$ 0,00, $h = 0{,}07$ y $h = 0{,}12$, a $T = 0{,}05$. El dopaje abre canales de dispersión dependientes del espín, mientras que la aplicación de un campo magnético rompe la equivalencia dinámica entre subredes en el regimen antiferromagnético. Panel derecho: Polarización de la conductividad DC. Las curvas muestran que tanto el dopaje como la intensidad del campo magnético actúan como parámetros de control externos que permiten ajustar no sólo la magnitud sino también el signo de $P$.

Al aumentar el dopaje, todas las curvas atraviesan $P = 0$ en un valor característico de $\delta$, indicando que la especie de espín dominante en el transporte se invierte. A partir de ese punto, la corriente pasa a estar controlada por los portadores con espín antiparalelo al campo. Este cambio de signo constituye una manifestación del reordenamiento de los canales de dispersión discutido anteriormente. Además, en las proximidades del cruce hacia el régimen paramagnético se observa un cambio apreciable en la pendiente de las curvas, reflejando la supresión del orden AFM de largo alcance.

Para campos más intensos, las curvas se vuelven progresivamente más planas y la magnitud de la polarización se reduce en la región de bajo dopaje. En el caso extremo $h = 0{,}12$, donde el orden AFM está completamente suprimido, la polarización es negativa en prácticamente todo el rango de dopajes considerado. En este régimen, el sistema se comporta como un metal paramagnético polarizado dominado por el campo externo, y los portadores mayoritarios en el transporte son aquellos con espín antiparalelo al campo.

En conjunto, estos resultados muestran que la polarización de la corriente es altamente sintonizable. Tanto el dopaje como la intensidad del campo magnético actúan como parámetros de control externos que permiten ajustar no sólo la magnitud sino también el signo de $P$. Esta capacidad de modulación continua de la respuesta espín–dependiente constituye uno de los rasgos centrales del mecanismo espintrónico identificado en el modelo de Hubbard antiferromagnético dopado.

La Fig. 5.6 muestra, a campo fijo $h = 0{,}07$, la evolución de las funciones espectrales locales

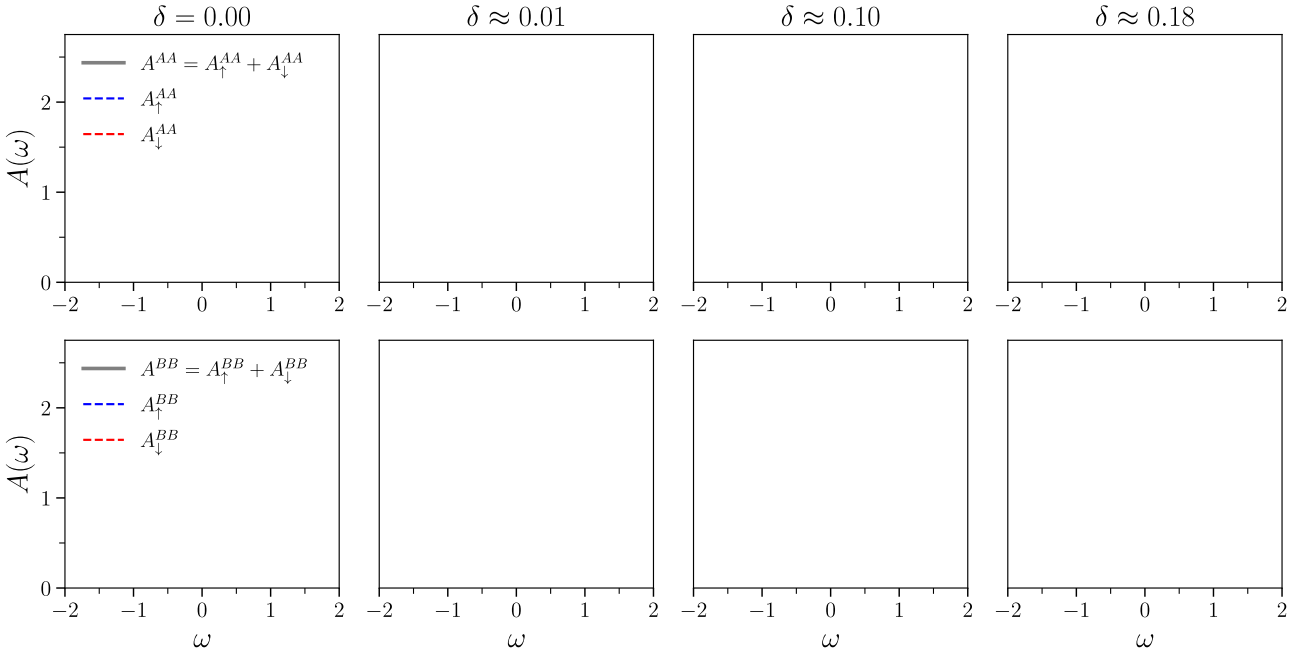


Figura 5.6.: Evolución de las funciones espectrales locales resueltas en espín para las subredes $A$ (fila superior) y $B$ (fila inferior) a campo fijo $h = 0{,}07$ y $T = 0{,}05$, para distintos dopajes: $\delta = 0$, $\delta \simeq 0{,}01$, $\delta \simeq 0{,}10$ y $\delta \simeq 0{,}18$. La línea gris corresponde al espectro total $A^{\alpha\alpha}(\omega) = A^{\alpha\alpha}_{\uparrow}(\omega) + A^{\alpha\alpha}_{\downarrow}(\omega)$, mientras que las líneas discontinua azul (roja) representan $A^{\alpha\alpha}_{\uparrow}(\omega)$ ($A^{\alpha\alpha}_{\downarrow}(\omega)$).

$A^{AA}_{\sigma}(\omega)$ y $A^{BB}_{\sigma}(\omega)$, desde el estado AFM aislante de Mott a llenado mitad hasta el régimen PM metálico a dopaje finito. Estos espectros permiten identificar de manera directa cómo se reorganiza el peso espectral en las proximidades del nivel de Fermi, que es el que controla la conductividad DC a través de la ventana térmica seleccionada por la derivada de la función de Fermi, $-\partial_{\omega} f(\omega)$, en la expresión de Kubo.

A llenado mitad (primera columna, $\delta = 0$), el sistema presenta una marcada asimetría entre subredes como consecuencia de la ruptura explícita de la simetría de Néel inducida por el campo $h = 0{,}07$. No obstante, la simetría PH preserva la relación de reflexión entre las componentes de espín alrededor del nivel de Fermi, imponiendo la estructura complementaria de los espectros discutida en la Sec. 5.3. La subred paralela exhibe un gap bien definido, mientras que la antiparalela —sujeta a una competencia más intensa entre el acoplamiento AFM y la energía de Zeeman— muestra una estructura más incoherente y un gap ligeramento ocupado, con una pequeña pero apreciable contribución de peso espectral en las proximidades de $\omega = 0$.

Al dopar levemente, $\delta \simeq 0{,}01$ (segunda columna), el sistema permanece en el régimen AFM, pero la deslocalización de la carga y el desbalance de espín inducen una redistribución asimétrica del peso espectral alrededor de $\omega = 0$. En particular, comienza a desarrollarse peso de baja energía en el canal de espín mayoritario de cada subred, señalando excitaciones metálicas incipientes sobre el fondo AFM. Esta reorganización es claramente más pronunciada en la subred antiparalela al campo externo.

A dopaje intermedio, $\delta \simeq 0{,}10$ (tercera columna), la reorganización espectral se vuelve cualitativamente más pronunciada. En la subred antiparalela al campo, ambas proyecciones de espín desarrollan picos que atraviesan el nivel de Fermi, dando lugar a un pico cuasipartícula abrupto y bien definido. Esta coincidencia refleja el debilitamiento sustancial del orden AFM y la progresiva polarización de esta subred en la dirección del campo. En contraste, en la subred paralela el gap comienza a ocuparse de manera más gradual, con una aparición incipiente de peso de baja energía pero sin alcanzar aún la misma coherencia observada en la subred complementaria. Esta asimetría en la formación del pico cuasipartícula que luego emergerá en el régimen PM, anticipa el reordenamiento de los canales dominantes en el transporte y está directamente vinculada al cambio de signo de la polarización $P(\delta)$ discutido previamente.

Finalmente, para $\delta \simeq 0{,}18$ (cuarta columna), el orden AFM de largo alcance ha colapsado y la distinción entre subredes pierde relevancia física. El sistema se encuentra ahora en un estado claramente metálico y polarizado, caracterizado por un pico cuasipartícula bien desarrollado en torno a $\omega = 0$. La asimetría entre componentes de espín persiste, pero ya no responde a una alternancia antiferromagnética sino a la polarización uniforme inducida por el campo Zeeman. En este régimen, el canal que contribuye de manera más significativa a la conducción es el correspondiente a los electrones antiparalelos al campo, en concordancia con el comportamiento negativo de la polarización $P$ observado en la Fig. 5.5.

Este comportamiento puede comprenderse en términos de un balance entre restricciones cinemáticas y coherencia dinámica en el modelo de Hubbard de una banda. En el régimen PM polarizado, el canal mayoritario experimenta un bloqueo cinemático más intenso debido a la exclusión de Pauli: la probabilidad de que un electrón con espín $\sigma$ encuentre un sitio destino disponible está controlada por el factor local $\langle 1 - n_\sigma \rangle$, que es menor para el espín más poblado. En contraste, el canal minoritario dispone de una mayor conectividad efectiva, ya que encuentra una fracción más grande de sitios accesibles para el salto. Sin embargo, estos procesos de transporte generan con mayor probabilidad estados doblemente ocupados ($\uparrow\downarrow$), penalizados energéticamente por $U$, lo que incrementa su tasa de dispersión, tal como se observa en la Fig. 5.5.

La conductividad resulta entonces del compromiso entre conectividad cinemática y coherencia dinámica: aunque el canal antiparalelo al campo presenta una mayor dispersión local, su mayor conectividad efectiva y el peso espectral desarrollado en las proximidades del nivel de Fermi favorecen su contribución al transporte. Este mecanismo, puramente correlacionado, explica por qué en el régimen PM polarizado la corriente puede quedar dominada por los portadores antiparalelos al campo, en concordancia con la polarización negativa observada en la Fig. 5.5.

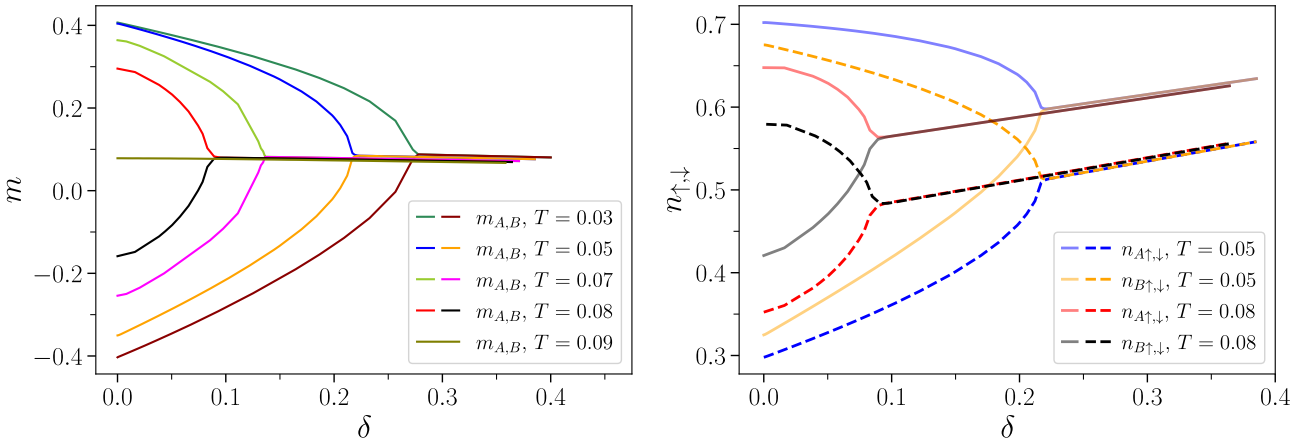


Figura 5.7.: Magnetizaciones resueltas por subred (panel izquierdo) y ocupaciones resueltas por espín (panel derecho) en función del dopaje electrónico $\delta$, para distintas temperaturas $T$, a campo magnético fijo $h = 0{,}04$. El aumento de la temperatura suprime progresivamente el orden antiferromagnético de Néel y reduce el desbalance de espín entre subredes inducido por el dopaje y el campo externo.

## 5.6. Efectos térmicos

En esta sección analizamos la evolución de las propiedades magnéticas y de transporte al modificar la temperatura, manteniendo fijo el campo magnético externo en un valor intermedio, $h = 0{,}04$. El objetivo es examinar cómo la competencia entre orden AFM y polarización Zeeman se ve afectada al variar la agitación térmica, y cómo esta evolución impacta en la polarización de la conductividad DC.

El panel izquierdo de la Fig. 5.7 muestra la evolución de las magnetizaciones resueltas por subred en función del dopaje para distintas temperaturas. A baja temperatura, el orden AFM es robusto y el momento escalonado persiste hasta dopajes relativamente elevados. Al incrementar $T$, el orden AFM se suprime progresivamente y el dopaje crítico $\delta_c$ se desplaza hacia valores menores. Para temperaturas suficientemente altas, el momento escalonado desaparece incluso a llenado mitad, indicando el colapso térmico del orden de largo alcance.

El panel derecho, a su vez, evidencia cómo el debilitamiento del orden AFM por efecto de las crecientes fluctuaciones térmicas se traduce en una reducción del desbalance de espín entre subredes. Las ocupaciones resueltas en espín se achatan progresivamente, reflejando que las fluctuaciones térmicas promueven una distribución más uniforme de la carga. En este régimen, la polarización inducida por el campo se ve favorecida por la creciente desorganización térmica del orden AFM, que desplaza la transición hacia el estado PM polarizado a valores menores del dopaje.

El panel izquierdo de la Fig. 5.8 muestra la evolución de las tasas de dispersión para distintos valores de $T$. A baja temperatura, las tasas presentan una fuerte dependencia tanto con el dopaje como con los grados de libertad de espín y subred, reflejando la presencia de correlaciones

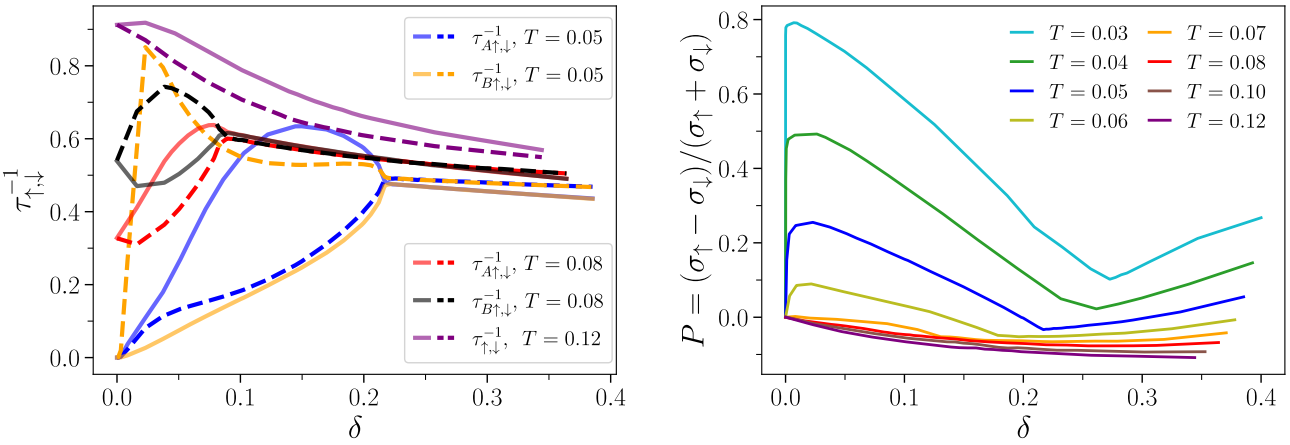


Figura 5.8.: Panel izquierdo: tasas de dispersión (inversos de los tiempos de vida) $\tau^{-1}_{\alpha\sigma}$ en función del dopaje $\delta$, para distintas temperaturas $T$, a campo fijo $h = 0{,}04$. Panel derecho: polarización de la conductividad DC $P = (\sigma_\uparrow - \sigma_\downarrow)/(\sigma_\uparrow + \sigma_\downarrow)$ como función del dopaje para las mismas temperaturas. El incremento de $T$ suaviza las asimetrías dinámicas entre canales de espín y reduce la polarización del transporte.

dinámicas intensas y una marcada asimetría entre canales. Al aumentar la temperatura, las curvas se suavizan progresivamente, indicando una pérdida de la coherencia y el tránsito hacia un régimen dominado por la dispersión térmica.

Un rasgo particularmente relevante a altas temperaturas es el cruce entre las tasas de dispersión de los canales de espín. Mientras que a baja $T$ el canal antiparalelo al campo presenta mayores fluctuaciones locales, al incrementarse la temperatura el canal mayoritario ($\uparrow$), alineado con el campo y de mayor ocupación, pasa a exhibir la dispersión más intensa. Este intercambio en la jerarquía de las tasas de dispersión señala un cambio cualitativo en el mecanismo dominante: la dinámica deja de estar gobernada por correlaciones antiferromagnéticas residuales y pasa a estar controlada principalmente por la polarización de ocupación y la agitación térmica.

El panel derecho de la Fig. 5.8 muestra, por su parte, la evolución con la temperatura de la polarización de la conductividad en función del dopaje. Se observa que la magnitud máxima de $P$ se alcanza a bajo dopaje y temperatura, cuando el orden AFM aún es robusto y las correlaciones dinámicas generan fuerte asimetrías entre los canales de espín. Al incrementar $T$, la polarización se reduce sistemáticamente, y las curvas se suavizan, reflejando la progresiva pérdida de coherencia y la supresión térmica del orden antiferromagnético. En este proceso, se amplía la región de dopajes en la cual $P$ cambia de signo y el transporte pasa a estar dominado por los portadores antiparalelos al campo. Para temperaturas suficientemente altas, la polarización se vuelve predominantemente negativa en casi todo el rango de dopajes.

La comparación entre el panel derecho de la Fig. 5.8 (variación con la temperatura a campo fijo) y el panel derecho de la Fig. 5.5 (variación con el campo a temperatura fija) revela un aspecto central del mecanismo identificado. En ambos casos, la aparición y expansión de regiones con polarización negativa no constituye un efecto puramente térmico ni exclusivamente inducido

por el campo, sino que está asociada a la supresión del régimen AFM correlacionado. Tanto el incremento de $h$ como el aumento de $T$ debilitan el orden AFM y reducen la estructura dinámica que favorece el dominio inicial del canal mayoritario. Una vez que este régimen colapsa, el transporte pasa a estar controlado principalmente por la polarización de ocupación inducida por el campo y por las restricciones cinemáticas propias del modelo de Hubbard de una banda, favoreciendo al canal antiparalelo. De este modo, la inversión del signo de $P$ emerge como una manifestación robusta de la transición desde un metal AFM correlacionado hacia un régimen PM polarizado.

## 5.7. Conclusiones

En este capítulo identificamos y caracterizamos un mecanismo mínimo, de origen puramente correlacionado, capaz de generar transporte de carga polarizado en espín en un antiferromagneto colineal estructuralmente convencional. En el modelo de Hubbard antiferromagnético, la polarización de la conductividad DC no surge de simetrías cristalinas específicas ni de texturas magnéticas no colineales, sino de la ruptura simultánea de dos restricciones de simetría independientes: (i) la simetría partícula–hueco (PH) —o su extensión PHsp a llenado mitad en presencia de campo— y (ii) la equivalencia dinámica entre subredes asociada a la simetría combinada $PT$. En ausencia de cualquiera de estas rupturas, las contribuciones de espín a la expresión de Kubo se compensan exactamente y la respuesta permanece degenerada, $\sigma_\uparrow = \sigma_\downarrow$.

A partir de las relaciones exactas impuestas por PHsp a llenado mitad, mostramos cómo la estructura de reflexión de los espectros alrededor del nivel de Fermi fuerza la cancelación de los canales de espín en la conductividad DC incluso cuando $PT$ está explícitamente rota por un campo Zeeman. El dopaje rompe PH y habilita asimetrías dinámicas fuertes en las ocupaciones y en las tasas de dispersión; sin embargo, mientras se preserve la equivalencia entre subredes, estas asimetrías siguen compensándose en el transporte. Sólo en el régimen dopado y con campo finito la degeneración se levanta y aparece una polarización finita de la corriente, cuya magnitud y signo pueden controlarse externamente.

El análisis sistemático en función del dopaje y del campo magnético, realizado a la temperatura intermedia $T = 0{,}05$ (aproximadamente 50 % de $T_N$), evidenció que la polarización alcanza sus valores máximos en el régimen de bajo dopaje y campos moderados, donde el orden AFM de Néel es aún robusto pero la equivalencia dinámica entre subredes ya ha sido rota por el término de Zeeman. En esta región de parámetros, el dopaje rompe la simetría PH y abre asimetrías dinámicas entre canales de espín, mientras que el campo rompe la compensación entre subredes; como resultado, pequeñas variaciones en $\delta$ u $h$ reconfiguran de manera apreciable el peso espectral dentro de la ventana térmica controlada por $-\partial_\omega f(\omega)$ en la expresión de Kubo, generando una respuesta espintrónica altamente sintonizable. Al aumentar el dopaje, todas

las curvas de $P(\delta)$ atraviesan un valor característico donde la polarización cambia de signo, revelando una inversión en el canal dominante de conducción y anticipando el cruce hacia un régimen PM polarizado.

La evolución de los espectros locales mostró que, en el régimen AFM dopado, la formación del pico de cuasipartícula es fuertemente asimétrica entre subredes y canales de espín; tras el colapso del orden de largo alcance, el sistema ingresa en un metal paramagnético polarizado donde la distinción entre subredes pierde relevancia, pero persiste una asimetría robusta entre espines. En este régimen, el canal antiparalelo al campo puede dominar el transporte como resultado de un balance no trivial entre restricciones cinemáticas —bloqueo por exclusión de Pauli del canal paralelo, más poblado— y la reconfiguración del peso espectral dentro de la ventana térmica relevante para la conductividad. La mayor conectividad efectiva del canal minoritario incrementa su movilidad y, simultáneamente, intensifica sus procesos de dispersión asociados a estados doblemente ocupados penalizados por $U$, de modo que su contribución al transporte surge del compromiso entre cinemática favorable y coherencia dinámica reducida.

Finalmente, el estudio de los efectos térmicos mostró que la inversión del signo de $P$ no constituye un fenómeno exclusivamente inducido por temperatura ni por campo: en ambos casos, la expansión de regiones con polarización negativa está asociada a la supresión del régimen AFM correlacionado. El aumento de $T$ debilita el orden de Néel, homogeniza las ocupaciones y modifica cualitativamente la jerarquía de las tasas de dispersión, reflejando un cambio de régimen dinámico desde un transporte dominado por correlaciones AFM hacia un régimen PM polarizado dominado por la dispersión térmica. En conjunto, dopaje, campo y temperatura emergen como parámetros de control externos que permiten modular continuamente la respuesta espín–dependiente del sistema.

Estos resultados establecen que los antiferromagnetos colineales correlacionados pueden funcionar como plataforma activa para espintrónica, aun en ausencia de mecanismos basados en simetrías cristalinas específicas. En particular, el modelo de Hubbard AFM dopado constituye un análogo correlacionado del transporte espín–polarizado en altermagnetos: en ambos casos, la polarización está dictada por principios de ruptura de simetría y no por magnetización neta. Esta conexión refuerza la idea de una ruta universal, controlada por correlaciones electrónicas, para generar y sintonizar corrientes polarizadas en espín en antiferromagnetos estructuralmente convencionales.

# 6. Metamagnetismo en el modelo de Hubbard antiferromagnético

El estudio de la respuesta de los sistemas fuertemente correlacionados frente a campos magnéticos externos revela una fenomenología especialmente rica. Entre estos comportamientos destaca el metamagnetismo, entendido en sentido amplio como la aparición de una variación no lineal —y, en ciertos casos, abrupta— de la magnetización al superar un campo crítico. Si bien los primeros modelos para metales itinerantes atribuyeron este fenómeno a una reconfiguración de bandas de espín en materiales cercanos a la inestabilidad ferromagnética [88], trabajos posteriores mostraron que también puede surgir en compuestos antiferromagnéticos, donde el campo aplicado compite directamente con el orden alternante de las subredes [89]. En este capítulo analizamos este mecanismo en el marco del modelo de Hubbard a llenado mitad, resuelto mediante DMFT, y mostramos que un campo magnético suficientemente intenso es capaz de desestabilizar el estado antiferromagnético (AF) aislante de bajas temperaturas e inducir una transición de primer orden hacia una fase paramagnética (PM) metálica, caracterizada por un salto discontinuo tanto en la magnetización como en la conductividad.

## 6.1. Relevancia del metamagnetismo localizado

Más allá del caso itinerante descrito por Wohlfarth y Rhodes [88], numerosos compuestos aislantes antiferromagnéticos exhiben transiciones de primer orden asociadas a momentos locales bien formados y a una fuerte anisotropía cristalina, lo que da lugar al denominado metamagnetismo localizado [89]. En estos sistemas, el campo aplicado compite con el orden alternante de las subredes, generando respuestas no lineales que pueden incluir saltos de magnetización, histéresis y la aparición de puntos multicríticos en el diagrama de fases.

Los ejemplos prototípicos de metamagnetismo localizado se encuentran en haluros y fosfatos de iones de metales de transición y tierras raras, tales como $FeCl_2$, $DyPO_4$ y $FeBr_2$, donde la estructura de niveles de los iones magnéticos, la anisotropía uniaxial y el acoplamiento antiferromagnético entre subredes generan diagramas de fase con transiciones de primer orden y puntos multicríticos [89]. En estos materiales, un campo aplicado a lo largo del eje fácil puede inducir una transición de primer orden de tipo inversión de espín (*spin-flip*), en la que el orden

antiferromagnético de baja temperatura colapsa abruptamente hacia un estado fuertemente magnetizado, acompañado por la formación de dominios metamagnéticos y fuertes anomalías en propiedades termodinámicas y de transporte. El comportamiento cercano a los puntos multicríticos, donde la línea de transiciones de primer orden termina en una transición continua, ha sido caracterizado tanto experimentalmente como teóricamente mediante modelos de Ising metamagnéticos con acoplamientos competitivos, que capturan de manera efectiva la física de momentos locales con anisotropía [90–93].

El desarrollo de la teoría de campo medio dinámico (DMFT) ha permitido extender el concepto de metamagnetismo a modelos microscópicos de electrones fuertemente correlacionados, en los que coexisten características de itinerancia y de localización. Laloux, Georges y Krauth [79] mostraron que, en el régimen próximo a la transición de Mott y dentro de la solución paramagnética, el modelo de Hubbard puede exhibir una transición de primer orden inducida por campo entre un metal fuertemente correlacionado y un aislante de Mott, acompañada por un salto en la magnetización. Más específicamente, Held, Ulmke y Vollhardt [86] estudiaron la fase antiferromagnética del modelo y demostraron que, a llenado mitad, un campo externo suficientemente intenso puede colapsar el estado AF aislante hacia una fase PM metálica mediante una transición metamagnética de primer orden, con coexistencia de soluciones y un punto multicrítico donde la transición pasa a ser continua.

El estudio presentado en este capítulo se centra en el modelo de Hubbard a llenado mitad, resuelto mediante DMFT sobre una red hipercúbica en presencia de un campo magnético uniforme. En el régimen de interacción y temperatura que consideramos, el estado fundamental a campo nulo es un aislante AF caracterizado por momentos locales bien definidos y un gap de Slater. En continuidad con los resultados de Held, Ulmke y Vollhardt [86], mostraremos que al incrementar el campo se produce una transición de primer orden entre esta fase AF aislante y una fase PM metálica fuertemente polarizada, con histéresis y coexistencia de soluciones en un rango finito de campos. La contribución principal de este capítulo consiste en profundizar esta caracterización conectando la transición magnética con la evolución de las funciones espectrales, las tasas de dispersión y las propiedades de transporte.

## 6.2. Modelo e implementación numérica

El modelo y el esquema de resolución utilizados en este capítulo siguen los procedimientos detallados en el Capítulo 4, Sección 4.2. Consideramos el modelo de Hubbard sobre una red hipercúbica en presencia de un campo magnético uniforme, a llenado mitad ($\mu = U/2$) y con parámetros $t = 0{,}5$ y $U = 1{,}7$, que sitúan al sistema en la fase AF aislante a bajas temperaturas.

La resolución del problema de impureza en el marco de DMFT se realizó mediante el método de Monte Carlo de tiempo continuo (CT-QMC) [67]. Las funciones espectrales en el eje real se

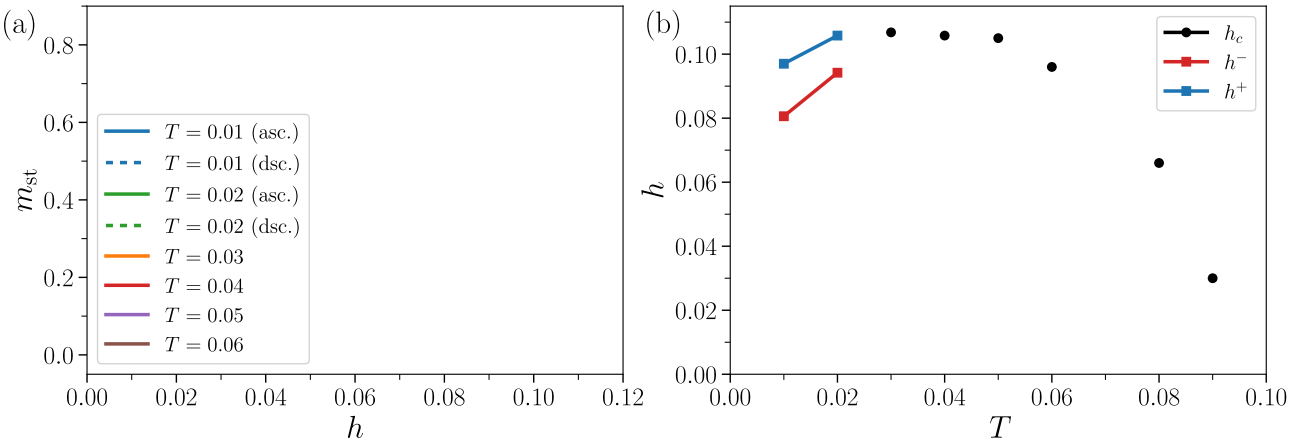


Figura 6.1.: (a) Magnetización antiferromagnética $m_{\mathrm{st}}$ en función del campo externo $h$ para distintas temperaturas. A bajas temperaturas, la transición AF–PM es de primer orden y se manifiesta a través de dos saltos discontinuos de $m_{\mathrm{st}}$ en los campos críticos $h^+$ y $h^-$, correspondientes a los barridos ascendente y descendente del campo. Al aumentar la temperatura, la histéresis desaparece y la transición se vuelve continua. (b) Diagrama de fases en el plano $(T, h)$ construido a partir de los campos críticos que separan las fases AF y PM. A temperaturas elevadas, la transición ocurre en un único campo crítico $h_{\mathrm{c}}$, mientras que a bajas temperaturas se identifican dos campos críticos distintos, $h^+$ y $h^-$, que delimitan una región de coexistencia de fases.

obtuvieron mediante continuación analítica por MaxEnt [68], y las propiedades de transporte se evaluaron con la fórmula de Kubo presentada en el Capítulo 3.

En la región de coexistencia de soluciones, la histéresis se analizó mediante barridos lentos del campo magnético: primero incrementándolo y luego reduciéndolo a partir de los estados previamente convergidos, lo que permitió seguir las ramas metaestables y caracterizar con precisión la transición de primer orden.

## 6.3. Resultados y Discusión

Comenzamos el análisis caracterizando la pérdida del orden antiferromagnético inducida por el campo magnético externo a través del parámetro de orden $m_{\mathrm{st}} = |m_A - m_B|$ (magnetización *staggered*), que permite identificar de manera directa la transición entre la fase AF y la fase PM. La Fig. 6.1 muestra la evolución de $m_{\mathrm{st}}$ en función del campo para distintas temperaturas, así como el diagrama de fases resultante en el plano $(T, h)$.

La Fig. 6.1(a) muestra la evolución de la magnetización antiferromagnética $m_{\mathrm{st}}$ en función del campo para distintas temperaturas. A temperaturas elevadas, $m_{\mathrm{st}}$ decrece de manera continua al aumentar el campo y se anula en un único campo crítico $h_{\mathrm{c}}$, característico de una transición de segundo orden entre la fase AF y la fase PM. Al disminuir la temperatura, la naturaleza de la transición cambia cualitativamente y pasa a ser de primer orden: en este régimen, es posible

identificar no uno sino dos valores críticos distintos, $h^+$ y $h^-$, correspondientes a los barridos ascendente y descendente del campo, respectivamente. La separación entre estos campos delimita una región de coexistencia de fases, en la cual las soluciones AF y PM coexisten como estados localmente metaestables, dando lugar al comportamiento histérico característico de los sistemas metamagnéticos.

El diagrama de fases resultante, mostrado en la Fig. 6.1(b), resume esta fenomenología, poniendo de manifiesto la competencia entre el orden antiferromagnético, la polarización inducida por el campo externo y la agitación térmica. Al aumentar la temperatura, la región de coexistencia se reduce y los campos críticos $h^+$ y $h^-$ eventualmente convergen, anticipando la terminación de la línea de primer orden en un punto crítico ubicado entre $T = 0{,}02$ y $T = 0{,}03$. Finalmente, la línea de transiciones de segundo orden se extingue en la temperatura de Néel del sistema, $T_N \approx 0{,}0925$.

Esta supresión progresiva de la temperatura de Néel mediante un campo magnético externo, junto con el cambio en la naturaleza de la transición —de continua a primer orden al acceder al régimen de bajas temperaturas— no es exclusiva de los metamagnetos clásicos de momentos locales, como $FeCl_2$ o $FeBr_2$, sino que ha sido reportada también en sistemas electrónicos fuertemente correlacionados más complejos. En particular, en compuestos de fermiones pesados basados en cerio, como $CePtIn_4$ [69], $Ce_2Sb$ y $Ce_2Bi$ [94], se han observado transiciones antiferromagnéticas inducidas por campo que exhiben histéresis, coexistencia de fases y la terminación de líneas de primer orden en puntos críticos finitos o cuánticos. Estos sistemas constituyen plataformas experimentales privilegiadas para el estudio de la criticalidad cuántica asociada a transiciones de fase magnéticas, donde las fluctuaciones cuánticas dominan la física a bajas temperaturas [95,96]. En este contexto, el modelo de Hubbard a acoplamiento intermedio emerge como un sistema mínimo y conceptualmente controlado que permite abordar esta problemática de manera íntegramente cuántica desde un punto de vista microscópico.

En lo que sigue, analizamos en detalle esta transición centrándonos en el caso $T = 0{,}02$, representativo del régimen metamagnético de bajas temperaturas. Comenzamos estudiando la evolución de la magnetización de cada subred en función del campo externo, para los barridos ascendentes y descendentes mostrados en la Fig. 6.2.

A campos débiles, el sistema presenta un estado AF bien definido, con $m_A \simeq -m_B$, manteniendo un orden de Néel robusto y sólo una débil desviación inducida por el campo externo. Al incrementar lentamente el campo (rama ascendente), la magnetización permanece prácticamente rígida hasta valores del orden de $h \sim 0{,}06$, donde la subred antiparalela comienza a desmagnetizarse de manera progresiva. A partir de allí, el sistema ingresa en un régimen AF polarizado que persiste hasta el campo crítico $h^+ \approx 0{,}106$, punto en el que se observa un salto discontinuo hacia un estado PM fuertemente polarizado, característico de una transición de primer orden.

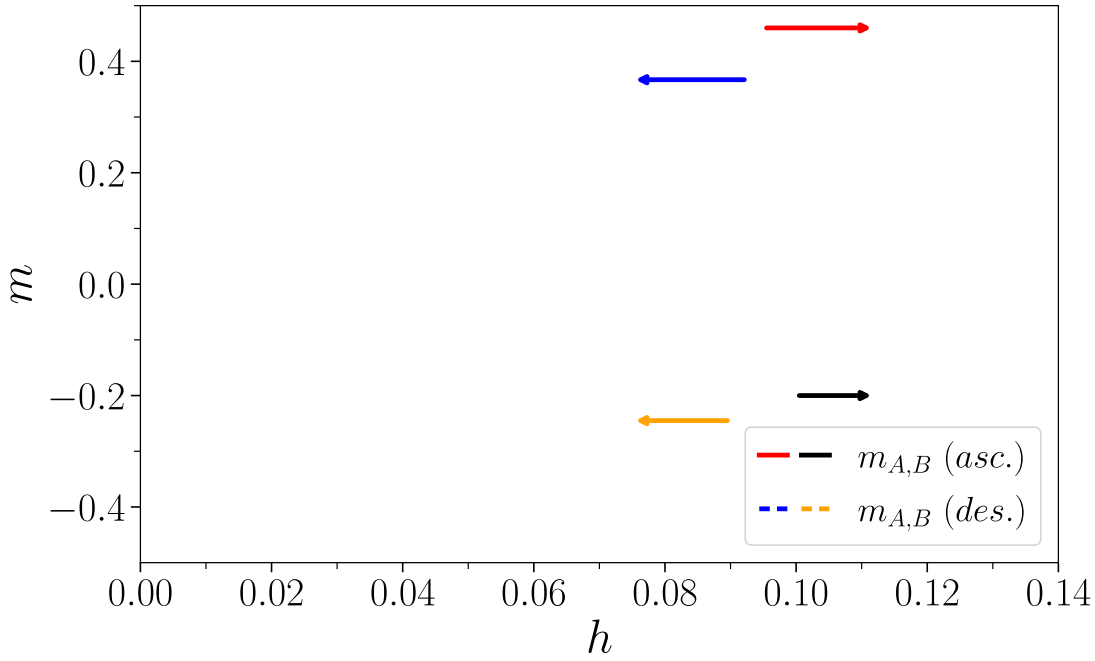


Figura 6.2.: Magnetización de las subredes $A$ y $B$ en función del campo magnético externo para $T = 0{,}02$. Se muestran los resultados obtenidos al incrementar el campo (curvas sólidas) y al disminuirlo (curvas punteadas), lo que permite identificar la histéresis asociada a la transición metamagnética de primer orden. Para campos débiles, el sistema permanece en la fase antiferromagnética con $m_A \simeq -m_B$. Al superar el valor crítico $h^+ \approx 0{,}106$, la solución AF colapsa hacia una fase PM fuertemente polarizada, mientras que en el barrido descendente la recuperación del estado AF ocurre recién en un segundo campo crítico $h^- \approx 0{,}094 < h^+$, delimitando así una región de coexistencia de soluciones.

Por otro lado, al disminuir el campo desde la fase PM polarizada (rama descendente), el sistema no retorna inmediatamente al estado AF. En su lugar, sigue una trayectoria distinta que permanece en la solución PM hasta un segundo valor crítico $h^- \approx 0{,}094$. Recién por debajo de este campo la solución AF vuelve a estabilizarse. La presencia de estos dos campos críticos, con $h^- < h^+$, delimita una región de coexistencia en la que ambas soluciones, AF y PM polarizada, son localmente estables. El lazo resultante constituye la histéresis característica de la transición metamagnética.

En sistemas reales, la región de histéresis de una transición metamagnética de primer orden se caracteriza por la coexistencia de dominios de fase AF y de fase polarizada (PM o FM). Esta coexistencia de fases y la evolución de los dominios durante barridos ascendentes y descendentes del campo han sido documentadas en diversos sistemas experimentales. Un ejemplo paradigmático lo constituyen aleaciones dopadas de $CeFe_2$, en las que se ha observado que al incrementar el campo por encima de un valor crítico, la fase FM nuclea dentro de la matriz AF en forma de clústeres de tamaño micrométrico, que crecen y se fusionan conforme progresa la transición, mientras que en el barrido descendente estos clústeres persisten como estados metastables por debajo del campo crítico de nucleación, dando lugar a una marcada

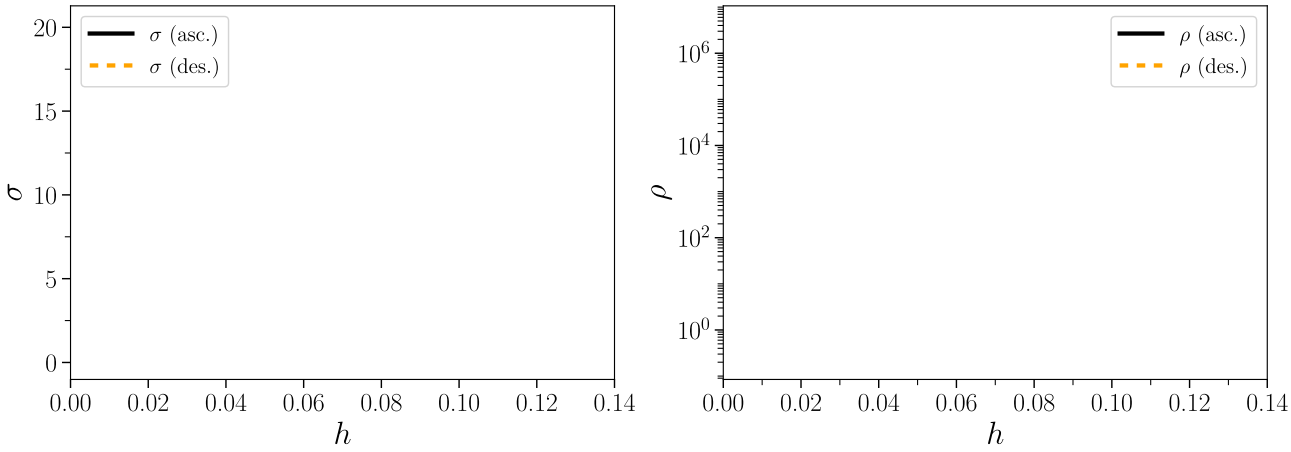


Figura 6.3.: Conductividad DC $\sigma$ (panel izquierdo) y resistividad $\rho$ (panel derecho) en función del campo magnético externo para $T = 0{,}02$. Se muestran los resultados correspondientes a barridos ascendentes (líneas sólidas) y descendentes (líneas punteadas) del campo. Al incrementar el campo, la conductividad presenta un salto abrupto en el campo crítico $h^+$, acompañado por una caída de varios órdenes de magnitud en la resistividad, señalando una transición aislante–metal inducida por campo. A campos más elevados, para $h > 0{,}12$, dentro de la fase PM fuertemente polarizada, la conductividad disminuye progresivamente debido a la reducción del espacio de fase disponible para el transporte como consecuencia del bloqueo por exclusión de Pauli. En el barrido descendente, la fase metálica persiste hasta el campo crítico inferior $h^-$, dando lugar a un lazo de histéresis en las propiedades de transporte, consistente con la naturaleza de primer orden de la transición metamagnética.

histéresis y a una región de coexistencia de fases [97]. Este tipo de comportamiento espacialmente inhomogéneo de las fases magnéticas en la región de transición es una firma característica de las transiciones de primer orden.

La transición metamagnética inducida por el campo tiene un impacto directo y abrupto en las propiedades de transporte. En la Fig. 6.3 se muestra la evolución de la conductividad DC $\sigma$ y de la resistividad $\rho = 1/\sigma$ en función del campo magnético para $T = 0{,}02$, calculadas a partir de la fórmula de Kubo.

Para campos débiles, correspondientes al régimen AF aislante, la conductividad permanece fuertemente suprimida y la resistividad alcanza valores muy elevados, reflejando la presencia de un gap de origen correlacionado. Al incrementar el campo (rama ascendente), la conductividad exhibe un salto abrupto en el campo crítico $h^+$, coincidente con el colapso del orden AF y la transición hacia la fase PM polarizada. Este salto se traduce en una caída abrupta de la resistividad de varios órdenes de magnitud, señalando una transición aislante–metal inducida por campo.

Para campos aún mayores, dentro de la fase PM fuertemente polarizada, la conductividad no continúa aumentando indefinidamente, sino que presenta una disminución progresiva al aumentar el campo, como se observa en el intervalo $0{,}12 \lesssim h \lesssim 0{,}14$. Este comportamiento

puede entenderse como una consecuencia del fuerte desbalance de espín inducido por el campo: a medida que la magnetización se aproxima a la saturación, el espacio de fase disponible para procesos de salto se reduce debido al bloqueo por exclusión de Pauli, lo que limita la movilidad electrónica y se traduce en una disminución de la conductividad.

De manera análoga a lo observado en la magnetización, el barrido descendente del campo revela un comportamiento histérico: la fase metálica persiste hasta el campo crítico inferior $h^-$, donde la conductividad vuelve a colapsar y el sistema recupera el carácter aislante. La coexistencia de soluciones metálicas y aislantes en el intervalo $h^- < h < h^+$ pone de manifiesto que la transición de transporte está íntimamente ligada a la naturaleza de primer orden de la transición magnética. En conjunto, estos resultados muestran que el metamagnetismo en el modelo de Hubbard AF va acompañado de una transición aislante–metal abrupta y con histéresis, seguida por un régimen de transporte limitado por polarización de espín a campos elevados.

Este mismo carácter abrupto de las propiedades de transporte a través de transiciones metamagnéticas de primer orden ha sido reportado en diversos sistemas reales. Un ejemplo prototípico lo constituyen las manganitas medio–dopadas, como $Nd_{1/2}Sr_{1/2}MnO_3$, en las que un campo magnético induce una transición de primer orden desde un estado AF aislante con orden de carga hacia una fase FM metálica, manifestándose en saltos discontinuos de la resistividad y una marcada histéresis en los barridos de campo [98]. Una fenomenología análoga se observa en compuestos intermetálicos AF como $Mn_3GaC$, donde una transición metamagnética de primer orden hacia una fase polarizada está acompañada por una magnetorresistencia abrupta e histérica, reflejando el fuerte acoplamiento entre el orden magnético y los mecanismos de dispersión electrónica [99]. Un caso particularmente relevante desde el punto de vista tecnológico es el del compuesto FeRh, que exhibe una transición metamagnética de primer orden entre un estado AF y uno FM polarizado, acompañada por un cambio abrupto de la resistividad. En películas delgadas, esta conmutación magneto–resistiva puede ser controlada mediante campo, temperatura o corriente eléctrica, lo que ha impulsado el uso de FeRh como material funcional en dispositivos espintrónicos de nueva generación, incluyendo memorias antiferromagnéticas y elementos lógicos reconfigurables [56, 100].

A continuación analizamos en la Fig. 6.4 la evolución de las tasas de dispersión locales $\tau_{\alpha\sigma}^{-1}$, resueltas por subred ($\alpha = A, B$) y proyección de espín ($\sigma =\uparrow, \downarrow$), para $T = 0{,}02$ y barridos ascendentes y descendentes del campo magnético.

En el régimen AF aislante de campos débiles, las tasas de dispersión permanecen prácticamente nulas para ambas subredes y proyecciones de espín, reflejando la ausencia de portadores coherentes. Al incrementar el campo (rama ascendente), $\tau_{\alpha\sigma}^{-1}$ comienza a crecer de manera abrupta a partir de $h \approx h^-$, indicando la activación de canales de dispersión asociados a la progresiva desestabilización del orden AF. Este incremento se ve interrumpido súbitamente al

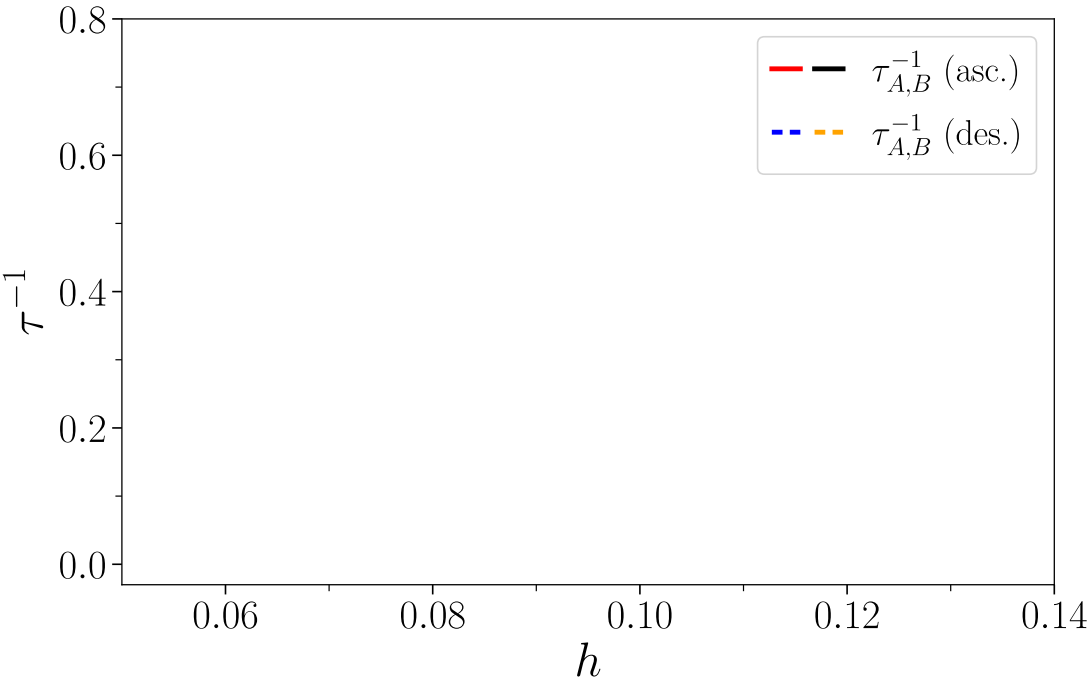


Figura 6.4.: Tasas de dispersión $\tau^{-1}_{\alpha\sigma}$ en función del campo magnético externo para $T = 0{,}02$, resueltas por subred ($\alpha = A, B$) y proyección de espín ($\sigma = \uparrow, \downarrow$). Se muestran los resultados correspondientes a barridos ascendentes (líneas sólidas) y descendentes (líneas punteadas) del campo. En la rama ascendente, las tasas de dispersión aumentan abruptamente a partir de $h \approx h^-$ y colapsan de manera súbita en $h^+$, donde el orden AF se destruye. En la rama descendente, las tasas de dispersión finitas persisten hasta $h^-$, donde colapsan abruptamente al restablecerse el estado AF aislante. A campos elevados, $\tau^{-1}_{\alpha\sigma}$ disminuye progresivamente, reflejando la reducción de fluctuaciones locales en el régimen fuertemente polarizado.

alcanzar el campo crítico superior $h^+$, donde el orden AF colapsa abruptamente y el sistema transita hacia la fase PM fuertemente polarizada.

Al disminuir el campo desde la fase PM polarizada (rama descendente), las tasas de dispersión finitas persisten hasta el campo crítico inferior $h^-$, punto en el cual los canales de dispersión colapsan abruptamente y el sistema recupera el carácter AF aislante. Este comportamiento dependiente de la historia del barrido da lugar a la histéresis observada en $\tau^{-1}_{\alpha\sigma}$ y constituye una manifestación directa de la naturaleza de primer orden de la transición metamagnética.

Por último, dentro de la fase PM fuertemente polarizada, las tasas de dispersión muestran una disminución progresiva al aumentar el campo, consistente con la reducción de fluctuaciones locales y con el bloqueo de procesos de dispersión a medida que la magnetización se aproxima a la saturación. Este comportamiento es coherente con la reducción observada en la conductividad a campos elevados.

Los resultados discutidos hasta aquí muestran que la transición metamagnética se manifiesta de manera consistente en la magnetización, el transporte y las tasas de dispersión electrónicas,

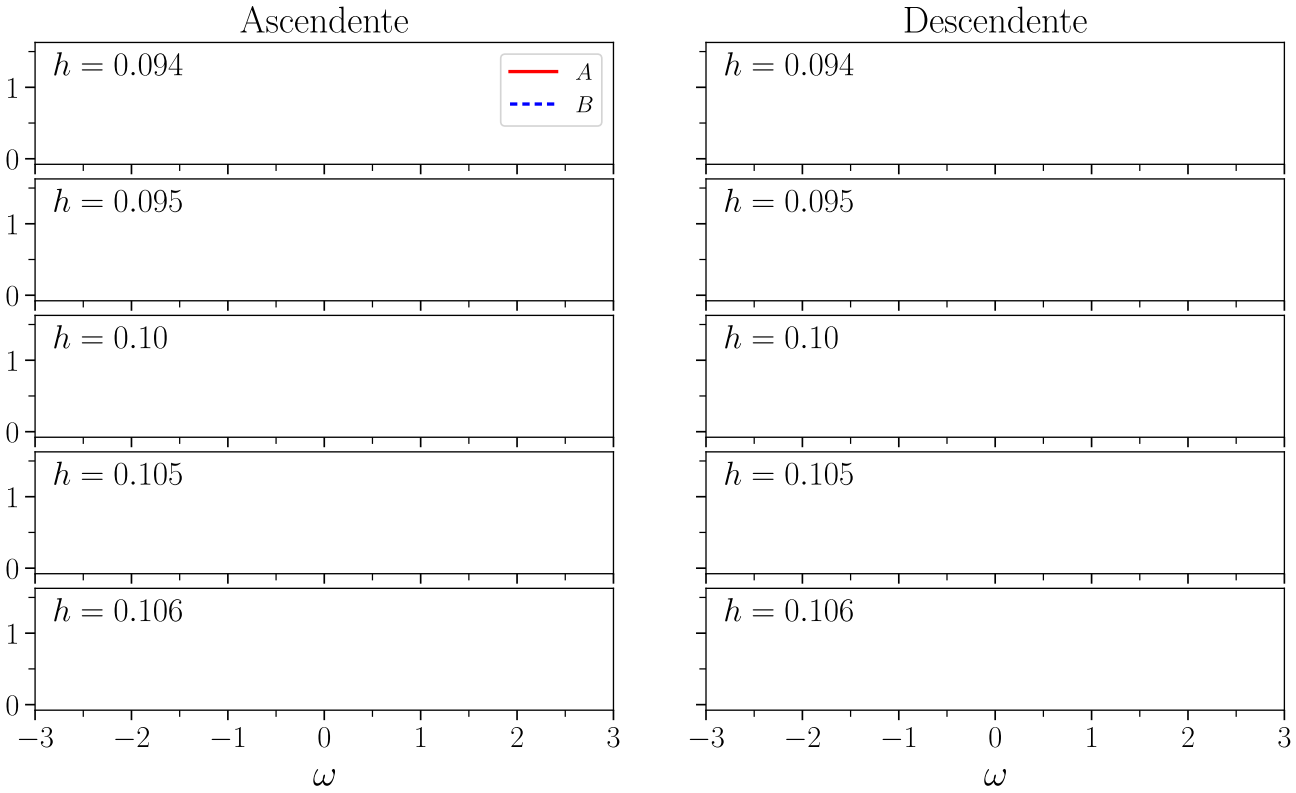


Figura 6.5.: Funciones espectrales locales $A_{\alpha\sigma}(\omega)$ para $T = 0{,}02$ y distintos valores del campo magnético externo dentro de la región de histéresis, $h^- \lesssim h \lesssim h^+$. En el barrido ascendente, el gap AF se desestabiliza progresivamente y colapsa de manera abrupta al superar el campo crítico superior $h^+ \approx 0{,}106$, dando lugar a un estado PM polarizado con peso espectral finito en el nivel de Fermi. En el barrido descendente, la solución metálica persiste hasta el campo crítico inferior $h^- \approx 0{,}094$, donde el sistema retorna súbitamente al estado AF aislante mediante la reapertura del gap, evidenciando una histéresis espectral consistente con la naturaleza de primer orden de la transición metamagnética.

reflejando una reorganización abrupta del estado electrónico del sistema. Para acceder de manera directa a este mecanismo microscópico, analizamos finalmente la evolución de las funciones espectrales locales $A_{\alpha\sigma}(\omega)$, que permiten visualizar el colapso del gap AF y la aparición de estados metálicos coherentes a lo largo de la zona de histéresis.

La Fig. 6.5 muestra la evolución de las funciones espectrales locales en la región de histéresis, tanto para el barrido ascendente como para el descendente del campo magnético a $T = 0{,}02$. En este rango de campos, el sistema puede estabilizarse en soluciones electrónicas cualitativamente distintas, dependiendo de la historia del barrido.

En el barrido ascendente, partiendo del estado AF aislante, las funciones espectrales exhiben un gap bien definido alrededor del nivel de Fermi. Al aumentar el campo, este gap se va desestabilizando de manera progresiva en ambas subredes, como consecuencia de la creciente polarización inducida por el campo y de la desmagnetización parcial de la subred antiparalela. Este proceso conduce a una transferencia gradual de peso espectral hacia bajas energías, hasta

que, al superar el campo crítico superior $h^+ \simeq 0{,}106$, el gap colapsa de manera abrupta y el sistema transita súbitamente hacia una fase paramagnética fuertemente polarizada con peso espectral finito en el nivel de Fermi.

En contraste, en el barrido descendente, partiendo desde la fase PM polarizada, las funciones espectrales conservan un peso metálico finito al reducir el campo dentro del intervalo de histéresis. Esta solución metálica persiste hasta alcanzar el campo crítico inferior $h^- \simeq 0{,}094$, donde el sistema colapsa abruptamente hacia el estado AF aislante. Este retorno súbito se manifiesta espectralmente mediante la reapertura del gap AF y la recuperación de la estructura espectral característica del orden de Néel.

Estos resultados confirman que la transición metamagnética en el modelo de Hubbard AF está asociada a una reorganización súbita del espectro electrónico, y refuerzan su naturaleza de primer orden.

## 6.4. Conclusiones

En este capítulo estudiamos el metamagnetismo en el modelo de Hubbard AF a llenado mitad mediante DMFT, mostrando que un campo magnético uniforme es capaz de desestabilizar el estado AF aislante de bajas temperaturas e inducir una transición hacia una fase PM metálica fuertemente polarizada. A partir de la evolución de la magnetización antiferromagnética $m_{\mathrm{st}}$ construimos el diagrama de fases $(T, h)$ e identificamos dos regímenes bien diferenciados: a temperaturas elevadas, la transición AF–PM es continua y ocurre en un único campo crítico $h_{\mathrm{c}}$, mientras que a bajas temperaturas se vuelve de primer orden, exhibiendo histéresis y dos campos críticos distintos $h^+$ y $h^-$ asociados a los barridos ascendente y descendente del campo. La convergencia de $h^+$ y $h^-$ al aumentar la temperatura sugiere la terminación de la línea de primer orden en un punto crítico ubicado entre $T = 0{,}02$ y $T = 0{,}03$.

Con el foco puesto en $T = 0{,}02$, analizamos en detalle el mecanismo microscópico asociado a la región histérica. La magnetización resuelta por subred evidencia la existencia de un régimen AF polarizado a campos intermedios y un colapso discontinuo del orden de Néel en $h^+ \simeq 0{,}106$, mientras que en la rama descendente el retorno al estado AF ocurre recién en $h^- \simeq 0{,}094$. Esta transición magnética se acompaña de una respuesta de transporte igualmente abrupta: la conductividad DC presenta un salto pronunciado en $h^+$, con una caída de varios órdenes de magnitud en la resistividad, señalando una transición aislante–metal inducida por campo y un comportamiento histérico consistente con la naturaleza de primer orden de la transición. A campos elevados, ya en la fase PM fuertemente polarizada, la conductividad decrece progresivamente, lo que interpretamos como una limitación cinética asociada al fuerte desbalance de espín y al bloqueo por exclusión de Pauli.

El análisis de las tasas de dispersión resueltas por subred y proyección de espín $\tau_{\alpha\sigma}^{-1}$ refuerza esta interpretación microscópica: en la rama ascendente los canales de dispersión se activan abruptamente a partir de $h \approx h^-$ y colapsan súbitamente en $h^+$, mientras que en la rama descendente las tasas finitas persisten hasta $h^-$ y desaparecen de manera abrupta al restablecerse el estado AF aislante. Finalmente, las funciones espectrales locales $A_{\alpha\sigma}(\omega)$ proporcionan la evidencia más directa de la reorganización electrónica asociada a la transición metamagnética: el gap AF se desestabiliza progresivamente con el campo y colapsa de manera abrupta al superar $h^+$, dando lugar a un peso espectral finito en el nivel de Fermi, mientras que en el barrido descendente la solución metálica persiste hasta $h^-$ y el gap se reabre de manera igualmente abrupta. Esta histéresis espectral constituye la contraparte microscópica de la histéresis observada en la magnetización y en las propiedades de transporte.

La fenomenología obtenida presenta paralelismos claros con observaciones experimentales en sistemas reales que exhiben transiciones metamagnéticas de primer orden acompañadas por respuestas abruptas en el transporte, tales como metamagnetos localizados clásicos, manganitas medio–dopadas, intermetálicos como $Mn_3GaC$ y FeRh, y aleaciones basadas en $CeFe_2$. En estos materiales, el colapso del orden antiferromagnético bajo campo se encuentra estrechamente ligado a la coexistencia de fases, a la histéresis y a reconstrucciones electrónicas abruptas, reforzando la relevancia del escenario aquí estudiado como descripción mínima de una física más general.

En conjunto, los resultados presentados consolidan la imagen de una transición metamagnética de primer orden en el modelo de Hubbard AF, en la que el colapso del orden magnético, la transición aislante–metal y la reorganización espectral constituyen manifestaciones inseparables de un mismo mecanismo microscópico. Desde una perspectiva más amplia, estos hallazgos subrayan el rol del modelo de Hubbard a acoplamiento intermedio como una plataforma teórica controlada para el estudio de transiciones de fase inducidas por campo, de fenómenos de coexistencia y de la emergencia de puntos críticos —clásicos o cuánticos— en sistemas fuertemente correlacionados. Como perspectivas futuras, resulta natural extender este análisis a un rango más amplio de temperaturas, con el objetivo de caracterizar con mayor precisión la vecindad del punto crítico terminal y explorar las firmas dinámicas y de transporte asociadas a la criticalidad cuántica.

# Parte II.

# Aplicaciones del modelo de Hubbard a sistemas complejos

Los fenómenos de correlación electrónica que emergen en el modelo de Hubbard trascienden los sistemas ideales de una sola banda o de redes ordenadas, encontrando manifestaciones en materiales reales y en arquitecturas artificiales de creciente complejidad. Esta segunda parte de la tesis aborda dos líneas de investigación que ilustran esa versatilidad: (i) el análisis experimental y teórico de la evolución de la función espectral en iridatos con fuerte acoplamiento espín–órbita, y (ii) la adaptación de la física de Mott–Hubbard desordenada al estudio del transporte electrónico en sólidos de nanopartículas semiconductoras.

En el **Capítulo 7** se presentan los resultados obtenidos en colaboración con el grupo de Véronique Brouet, publicados en *The European Physical Journal B* [101]. En dicho trabajo se investigó, mediante espectroscopía de fotoemisión resuelta en ángulo (ARPES), la evolución de las líneas espectrales en los compuestos iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$ en función del dopaje y de la temperatura a través de la transición magnética. Estos sistemas constituyen realizaciones paradigmáticas del estado de Mott con acoplamiento espín–órbita ($J_{\text{eff}} = 1/2$) y ofrecen una plataforma excepcional para examinar el cruce continuo entre los regímenes antiferromagnéticos tipo Mott y tipo Slater. La comparación sistemática entre los espectros experimentales y los cálculos de DMFT reveló que en $Sr_2IrO_4$ la transición magnética se produce sin cierre del gap de correlación $\Delta$, en consonancia con un mecanismo de tipo Mott dominado por excitaciones incoherentes; mientras que en $Sr_3Ir_2O_7$ la supresión del orden AF con el aumento de la temperatura conduce al cierre progresivo del gap magnético coherente $\delta_S$ y a un desplazamiento de peso hacia el nivel de Fermi, característica distintiva de un mecanismo itinerante tipo Slater. De esta manera, el estudio de la dependencia con el dopaje de las líneas espectrales permitió identificar dos escalas energéticas complementarias —$\Delta$ y $\delta_S$— y establecer una descripción unificada de la transición magnética en términos del cruce entre los límites fuertemente correlacionado (Mott) e itinerante (Slater).

El **Capítulo 8** está dedicado a los resultados obtenidos junto al grupo del Dr. Gergely Zimanyi, publicados en *Nano Letters* [102]. En este trabajo se abordó la física de transporte en sólidos de nanopartículas semiconductoras a partir de la analogía con el modelo de Hubbard desordenado. Mediante un enfoque combinado —la simulación jerárquica de transporte (HiNTS) que accede a las fases localizadas, y la teoría de campo medio dinámico (DMFT) que describe las fases metálicas— se construyó un diagrama de fases integral que distingue las transiciones entre los regímenes localizados por desorden (tipo Anderson) y por interacciones (tipo Mott). Se mostró que la movilidad electrónica de estos sólidos exhibe mínimos pronunciados al cruzar llenados enteros, reflejando bloqueos de Coulomb análogos a los gaps de Mott–Hubbard. La correspondencia cuantitativa entre las simulaciones y los datos experimentales en películas de PbSe y CdSe permitió reinterpretar los mecanismos de transporte en celdas solares nanoparticuladas dentro del marco unificado de la física de Mott desordenada.

# 7. Evolución espectral con el dopaje en la transición magnética de los iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$

El regímen antiferromagnético (AF) del modelo de Hubbard constituye un terreno fértil para explorar el origen microscópico del orden magnético y las propiedades espectrales de los sistemas fuertemente correlacionados. Dependiendo de la intensidad de las interacciones electrón-electrón, pueden distinguirse dos mecanismos cualitativamente distintos que dan lugar a estados AF: el régimen de *Slater*, característico de sistemas itinerantes donde el orden surge por inestabilidades en las próximidades del nivel de Fermi, y el régimen de *Mott–Heisenberg*, propio de aislantes con momentos locales bien definidos.

En este capítulo presentamos un estudio comparativo de los regímenes de Slater y Mott dentro del modelo de Hubbard, combinando cálculos teóricos basados en DMFT con resultados experimentales en óxidos de iridio [101]. El análisis se centra en la evolución de las funciones espectrales con el dopaje, aspecto que permite establecer una conexión directa entre los resultados teóricos y las medidas de fotoemisión resuelta en ángulo (ARPES). Los compuestos $Sr_3Ir_2O_7$ y $Sr_2IrO_4$ constituyen ejemplos paradigmáticos de los regímenes de Slater y Mott, respectivamente, y ofrecen un marco ideal para examinar cómo la correlación y la ocupación electrónica determinan la redistribución de peso espectral entre las bandas de baja y alta energía.

Los resultados numéricos obtenidos para distintos valores de la interacción $U/D$ muestran cómo el dopaje induce una transferencia progresiva de peso espectral desde los bordes del gap de correlación hacia el nivel de Fermi. Esta evolución, comparada con los espectros experimentales, permite identificar las huellas características de los regímenes de Slater y Mott, y proporciona una visión coherente del comportamiento espectral de los sistemas AF dopados.

## 7.1. Modelo y metodología

Los cálculos teóricos presentados en este capítulo se realizaron sobre el modelo de Hubbard de una banda, definido por el Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left( c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}, \tag{7.1}$$

donde $t$ representa la amplitud de salto entre primeros vecinos, $U$ la interacción local de Coulomb y $\mu$ el potencial químico que fija la ocupación promedio.

La red subyacente es una red de Bethe con conectividad infinita, lo que conduce a una densidad de estados no interactuante semicircular de semiancho de banda $D = 2t$. En los cálculos se adoptó $t = 0{,}5$, de modo que la unidad de energía queda fijada por $D = 1$.

La DMFT es implementada mediante el algoritmo de Monte Carlo cuántico continuo en el espacio de tiempo imaginario (CT-QMC) [67]. El procedimiento iterativo seguido para la solución autoconsistente es el que se describe en la sección 2.3.2.

Las funciones espectrales $A(\omega)$ se obtuvieron a partir de las autoenergías locales mediante continuación analítica del eje imaginario al real utilizando el método de máxima entropía (MaxEnt) [68]. Los resultados se analizaron para dos valores representativos de la interacción: $U/D = 1{,}7$, correspondiente al régimen débil tipo Slater (relevante para $Sr_3Ir_2O_7$), y $U/D = 4{,}0$, representativo del régimen fuertemente correlacionado de Mott–Heisenberg (relevante para $Sr_2IrO_4$). Para cada caso se exploró un amplio rango de dopajes, ajustando el potencial químico $\mu$ con el fin de describir la evolución espectral del sistema al introducir huecos respecto del llenado mitad.

Este enfoque proporciona un marco cualitativo para comparar la redistribución de peso espectral con las observaciones experimentales de fotoemisión resuelta en ángulo (ARPES) en los óxidos basados en iridio considerados [101]. Una comparación cuantitativa más detallada requeriría la utilización de descripciones materiales más realistas, capaces de incorporar correlaciones espaciales de corto alcance (por ejemplo, mediante extensiones de tipo *cluster* de la DMFT), acoplamiento espín–órbita, efectos multibanda y, eventualmente, bandas débilmente correlacionadas dentro de un marco *ab initio*. Estos aspectos, que demandan desarrollos futuros [103–106], exceden el alcance del presente trabajo, cuyo objetivo principal es analizar las propiedades generales del cruce AF entre los regímenes de Slater y de Mott en el modelo de Hubbard.

Figura 7.1.: (a) Esquema de la estructura electrónica esperada para $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$, con las bandas $J_{\text{eff}} = 1/2$ divididas en bandas inferior y superior de Hubbard (LHB y UHB) separadas por un gap $\Delta$. (b) Resistividad en función de la temperatura para $Sr_2IrO_4$, pura y dopada con Ru (sustitución con huecos) o La (sustitución con electrones). (c) Resistividad en función de la temperatura para $Sr_3Ir_2O_7$. Las flechas indican las temperaturas de transición magnética $T_N$. Adaptado de Ref. [101].

## 7.2. Comportamiento de la resistividad

La evolución de la resistividad con la temperatura ofrece una primera evidencia clara del papel distintivo que juega la transición magnética en los dos compuestos analizados. En la Fig. 7.1 se muestran las resistividades experimentales de $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$, tanto en los compuestos puros como en los dopados con Ru (sustitución con huecos) y La (sustitución con electrones) [101]. Las flechas indican la temperatura de Néel $T_N$, determinada a partir de mediciones magnéticas (SQUID para $Sr_2IrO_4$ y neutrones para $Sr_3Ir_2O_7$). Mientras que en $Sr_2IrO_4$ la resistividad no presenta cambios apreciables en la $T_N$, en $Sr_3Ir_2O_7$ se observa una anomalía marcada que señala el pasaje a un estado más conductor en el régimen paramagnético (PM).

La dependencia en temperatura no sigue una ley activada simple a lo largo de todo el rango térmico. Un ajuste en el intervalo entre 100 y 200 K arroja un gap efectivo $\delta \simeq 60$ meV, mucho menor que el gap de correlación $\Delta$ estimado a partir de los espectros de ARPES. Esta diferencia puede interpretarse como la energía característica entre los bordes de las colas de las bandas, ilustradas esquemáticamente en la Fig. 7.1(a), y resalta la relevancia de los estados dentro del gap que contribuyen al transporte a bajas energías. El análisis subraya también que la información extraída de resistividades por sí sola resulta insuficiente para caracterizar la evolución completa de $\Delta$.

Figura 7.2.: (a) Dependencia con la temperatura de la resistividad calculada mediante DMFT para $U/D = 4{,}0$ y distintos dopajes $x$. (b) Igual que en (a) para $U/D = 1{,}7$. Las flechas indican la temperatura de transición magnética $T_N$. Los resultados reproducen cualitativamente la evolución experimental mostrada en la Fig. 7.1, destacando el contraste entre los regímenes de Mott y Slater.

Los resultados teóricos obtenidos mediante DMFT reproducen cualitativamente el comportamiento experimental, tal como se muestra en la Fig. 7.2. Las curvas de resistividad calculadas para distintos dopajes y dos valores característicos de la interacción —$U/D = 4{,}0$ (régimen de Mott fuertemente correlacionado) y $U/D = 1{,}7$ (régimen de Slater débilmente correlacionado)— exhiben una evolución con la temperatura análoga a la observada experimentalmente. En el régimen de Mott, la resistividad es alta y decrece suavemente con la temperatura, sin mostrar anomalías en $T_N$, en concordancia con el comportamiento de $Sr_2IrO_4$. En cambio, en el régimen de Slater la resistividad muestra una caída abrupta alrededor de $T_N$, análoga a la transición observada en $Sr_3Ir_2O_7$. Estas características desaparecen a dopajes mayores, donde se pierde el orden magnético y el sistema adquiere un carácter PM metálico.

En conjunto, la comparación entre las resistividades experimentales y las obtenidas mediante DMFT refuerza la interpretación de que $Sr_2IrO_4$ se encuentra profundamente en el régimen de Mott, mientras que en $Sr_3Ir_2O_7$ ambos mecanismos, correlación electrónica y magnetismo de Slater, desempeñan un papel activo.

## 7.3. Evolución de las líneas espectrales

Los espectros obtenidos dentro de DMFT permiten establecer una comparación cualitativa entre los regímenes de Slater y Mott en lo que respecta a la evolución de las líneas espectrales de los óxidos iridatos con la temperatura y el dopaje. En la Fig. 7.3 se muestran los espectros

Figura 7.3.: Evolución con la temperatura de los espectros DMFT antiferromagnéticos para pequeño dopaje de huecos, $x = 2{,}5\,\%$ y $x = 3{,}5\,\%$, para los regímenes de correlación fuerte y débil, respectivamente. (a) Régimen de Mott fuertemente correlacionado ($U/D = 4{,}0$), con gap $\Delta$ bien definido entre las bandas de Hubbard. (b) Régimen de Slater débilmente correlacionado ($U/D = 1{,}7$), donde el gap antiferromagnético $\delta_S$ se cierra al aproximarse a $T_N$. Las líneas rojas y azules corresponden a espines opuestos; la línea negra representa el espectro total.

calculados para un pequeño dopaje de huecos en dos casos representativos: $x = 2{,}5\,\%$ para el régimen de Mott fuertemente correlacionado ($U/D = 4{,}0$, izquierda) y $x = 3{,}5\,\%$ para el régimen de Slater débilmente correlacionado ($U/D = 1{,}7$, derecha). Cada conjunto de curvas corresponde a distintas temperaturas normalizadas a la temperatura de Néel $T_N$. Las líneas rojas y azules representan las componentes de espín opuesto, y la línea negra indica el espectro total.

En el régimen fuertemente correlacionado ($U/D = 4{,}0$), los espectros presentan un gap de Mott bien definido a bajas temperaturas, denotado por $\Delta$, que separa las bandas inferior (LHB) y superior (UHB) de Hubbard. Con el dopaje aparece un pequeño pico de cuasipartícula (QP) en el borde superior de la LHB, indicando una leve contribución metálica dentro de la fase AF. La estructura de picos para espines opuestos revela un desbalance en el peso espectral, asociado a la polarización magnética local. A medida que la temperatura aumenta, la posición de los picos y la amplitud del gap $\Delta$ se mantienen esencialmente invariables, lo que indica que la supresión del orden AF se produce principalmente por la pérdida de la diferencia de peso espectral entre

Figura 7.4.: Perfiles experimentales medidos por ARPES para distintos regímenes de correlación y temperatura. Los paneles (a) y (b) muestran líneas de intensidad medidas por ARPES tras la sustracción del fondo, mientras que los paneles (c) y (d) reproducen una descomposición fenomenológica, inspirada en la estructura pico (contribución coherente)–joroba (contribución incoherente) característica de DMFT, cuya suma da lugar al espectro total. La evolución espectral ilustra la transición desde un régimen fuertemente correlacionado de tipo Mott ($Sr_2IrO_4$), dominado por excitaciones incoherentes, hacia un régimen itinerante de Slater ($Sr_3Ir_2O_7$), en el cual el pico coherente gana peso y se desplaza hacia el nivel de Fermi al aumentar la temperatura, reflejando el cierre progresivo del gap magnético $\delta_S$. Adaptado de Ref. [101].

espines, sin que se cierre el gap de correlación. Este comportamiento reproduce las características observadas experimentalmente en $Sr_2IrO_4$, donde el sistema permanece aislante por encima de la $T_N$.

Por el contrario, en el régimen de Slater ($U/D = 1{,}7$) el gap entre las bandas de Hubbard es menor y las características de cuasipartícula son más marcadas. A bajas temperaturas, la separación entre espines define un pequeño gap AF $\delta_S$ alrededor del nivel de Fermi. Al incrementar la temperatura, el gap $\delta_S$ se reduce y finalmente se cierra cerca de la $T_N$, generando una redistribución de peso espectral hacia el nivel de Fermi. La desaparición de la diferencia de peso entre los canales de espín conduce a la restauración de la simetría PM y a una respuesta metálica a altas temperaturas. Este mecanismo refleja el carácter itinerante del orden de Slater, en el que la transición magnética y la apertura del gap están estrechamente acopladas.

La Fig. 7.4 muestra los perfiles experimentales medidos por ARPES a bajas y altas temperaturas para distintos regímenes de correlación. Dado que estas mediciones no resuelven de manera directa la estructura de pico–joroba predicha por DMFT —debido tanto a la resolución instrumental finita como a la naturaleza dependiente del momento del experimento—, en los paneles (c) y (d) los espectros se reconstruyen mediante una descomposición fenomenológica en contribuciones coherentes (picos) e incoherentes (jorobas), cuya superposición da lugar al espectro total.

En el régimen de Mott, representativo de $Sr_2IrO_4$, el perfil ARPES a bajas temperaturas es ancho y aproximadamente simétrico, lo que se interpreta como una dominancia de la contribución incoherente asociada a las bandas de Hubbard. En este caso, la evolución espectral muestra una escasa sensibilidad a la temperatura de Néel $T_N$, consistente con el escenario de fuerte correlación en el cual la mayor parte del peso espectral reside en excitaciones incoherentes que no dependen directamente del orden magnético de largo alcance. Cabe señalar que, aun si existiera una contribución coherente residual de muy bajo peso en este régimen, su detección experimental podría verse suprimida por efectos de desorden e impurezas presentes en el material real.

En contraste, en el régimen de Slater, relevante para $Sr_3Ir_2O_7$, la evolución espectral está dominada por la contribución coherente. A bajas temperaturas, el pico coherente y la joroba incoherente presentan pesos comparables, dando lugar a un perfil más asimétrico. Al aumentar la temperatura y atravesar $T_N$, los cambios observados se deben principalmente a la evolución del pico coherente, que se desplaza progresivamente hacia el nivel de Fermi, como se esquematiza en el recuadro del panel (d). Este corrimiento es consistente con el cierre del gap AF $\delta_S$ característico del régimen débilmente correlacionado.

Cabe destacar que el desplazamiento del pico coherente en $Sr_3Ir_2O_7$ es solo indirectamente consecuencia del cierre de $\delta_S$. El mecanismo principal es la relocalización del nivel de Fermi hacia el centro de la escala energética $\Delta$. En el marco teórico, existe una diferencia clara entre los casos de Mott y Slater a bajos dopajes: en el régimen de Mott, el pico de cuasipartícula se forma en el borde de la banda de Hubbard, sin un gap residual, mientras que en el régimen de Slater emerge en el borde del gap magnético remanente $\delta_S$, a energías del orden de $\Delta/2$. Experimentalmente, mientras un gap de baja energía permanece abierto —ya sea $\Delta$ o $\delta_S$— grados de libertad extrínsecos como desorden, impurezas o dopantes pueden fijar la posición de $E_F$ dentro del gap. En consecuencia, a bajas temperaturas las posiciones del pico son similares en $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$ para un mismo dopaje. Una vez que el gap $\delta_S$ se cierra, $E_F$ se fija en la posición teórica correspondiente, induciendo el corrimiento observado en el régimen débilmente correlacionado.

En síntesis, estos resultados muestran que la evolución espectral con la temperatura y el dopaje permite distinguir claramente los mecanismos de apertura de gap en los regímenes de Slater y Mott. En el primero, el cierre del gap magnético $\delta_S$ acompaña la supresión del

orden AF y conduce a un comportamiento metálico caracterizado por la emergencia de estados coherentes cercanos al nivel de Fermi. En el segundo, el gap de Mott $\Delta$, asociado a la física de correlación local, persiste por encima de $T_N$, manteniendo el carácter aislante del sistema. Esta diferenciación energética constituye una firma espectral robusta del cruce entre los regímenes de Slater y Mott dentro del modelo de Hubbard.

## 7.4. Conclusiones

En este capítulo hemos analizado la evolución espectral asociada a la transición magnética en los iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$, combinando resultados experimentales de ARPES con cálculos teóricos basados en el modelo de Hubbard AF resuelto mediante DMFT. Este enfoque ha permitido establecer un marco unificado para interpretar el cruce entre los regímenes de Slater y Mott en sistemas AF dopados.

Nuestros resultados muestran que los iridatos constituyen ejemplos paradigmáticos de sistemas con correlación intermedia, en los cuales la línea espectral resulta de la coexistencia entre excitaciones incoherentes de tipo Hubbard y contribuciones coherentes de cuasiparticula. La importancia relativa de estas contribuciones depende de la intensidad de la interacción electrónica y del carácter del orden magnético, y se manifiesta de manera clara en la evolución con la temperatura y el dopaje.

En el régimen fuertemente correlacionado, representativo de $Sr_2IrO_4$, la física está dominada por un gap de Mott $\Delta$, asociado a la separación entre las bandas de Hubbard. Este gap permanece esencialmente inalterado a través de la transición magnética, lo que explica tanto la ausencia de anomalías en la resistividad como la escasa sensibilidad de los espectros ARPES a la temperatura de Néel. La posible presencia de una contribución coherente residual de muy bajo peso queda, además, fácilmente enmascarada por efectos extrínsecos como desorden e impurezas, lo que refuerza el carácter predominantemente incoherente del estado aislante.

En contraste, en el régimen débilmente correlacionado de tipo Slater, relevante para $Sr_3Ir_2O_7$, la apertura y el cierre del gap AF $\delta_S$ están estrechamente ligados al orden magnético. El cierre de este gap al atravesar $T_N$ induce una redistribución sustancial del peso espectral hacia el nivel de Fermi, dando lugar a un comportamiento metálico a altas temperaturas. Este proceso se acompaña de una relocalización del nivel de Fermi hacia el centro de la escala energética $\Delta$, lo que explica el corrimiento global de las líneas espectrales observado experimentalmente.

La comparación entre ambos regímenes pone de manifiesto la existencia de dos escalas de energía bien diferenciadas: un gap de Mott $\Delta$, controlado por correlaciones locales y poco sensible al orden magnético de largo alcance, y un gap magnético $\delta_S$, de origen itinerante, directamente vinculado a la transición AF. La competencia y jerarquía entre estas escalas proporciona una

firma espectral robusta del cruce entre los regímenes de Slater y Mott dentro del modelo de Hubbard.

Finalmente, estos resultados subrayan el valor del modelo de Hubbard, aun en su versión mínima de una sola banda, como herramienta conceptual para comprender los mecanismos fundamentales que gobiernan la dinámica espectral de materiales reales fuertemente correlacionados. Extensiones futuras que incorporen descripciones multibanda, acoplamiento espín–órbita y correlaciones espaciales de corto alcance permitirán avanzar hacia una caracterización cuantitativa más detallada de los iridatos y de otros sistemas AF con correlaciones fuertes.

# 8. Bloqueo de Coulomb y transición metal-aislante en sólidos de nanopartículas

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en colaboración con el grupo del Dr. Gergely Zimanyi de la Universidad de California en Davis (UCD), publicados en la revista *Nano Letters* [102]. Este trabajo aborda la física del transporte electrónico en sólidos semiconductores constituidos por nanopartículas (NPs), interpretándolos dentro del marco del modelo de Hubbard desordenado. Para ello, se combinaron dos métodos complementarios: el simulador jerárquico de transporte HiNTS (*Hierarchical Nanoparticle Transport Simulator*), desarrollado en UCD, que permite acceder al régimen de transporte fuertemente localizado, y la teoría de campo medio dinámico (DMFT), implementada en nuestro grupo, que proporciona un tratamiento autoconsistente de las correlaciones electrónicas y es capaz de describir tanto fases localizadas como deslocalizadas.

El análisis conjunto de ambos enfoques permitió construir un diagrama de fases cualitativo que distingue las transiciones entre regímenes localizados dominados por el desorden (tipo Anderson) y por las interacciones electrónicas (tipo Mott), así como la aparición de fases metálicas intermedias. En este contexto, HiNTS resulta adecuado para describir el transporte en el régimen fuertemente localizado, mientras que, por su propia construcción, no permite capturar estados electrónicos deslocalizados. Por el contrario, DMFT permite acceder de manera controlada tanto a las fases aislantes como a las deslocalizadas, proporcionando una descripción unificada de la transición metal–aislante inducida por interacciones y desorden.

En particular, se mostró que la movilidad electrónica exhibe mínimos pronunciados al cruzar llenados enteros, no solo en la fase localizada sino también en la fase deslocalizada, revelando la persistencia del bloqueo de Coulomb a través de la transición metal–aislante. Este resultado establece una correspondencia cuantitativa entre las simulaciones teóricas y los datos experimentales en películas de PbSe y CdSe, y proporciona un marco unificado para interpretar los mecanismos de transporte en celdas solares nanoparticuladas.

## 8.1. El confinamiento cuántico y el bloqueo de Coulomb en sólidos de nanopartículas

Los sólidos de NPs constituyen materiales emergentes de notable interés tecnológico. En ellos, los electrones se encuentran confinados dentro de las NPs, dando lugar a un fenómeno conocido como confinamiento cuántico. Este confinamiento hace que el ancho del gap electrónico dependa inversamente del diámetro de las NPs [107], otorgando a estos sistemas una gran flexibilidad en sus propiedades ópticas y electrónicas. Tal característica ha motivado su aplicación en dispositivos optoelectrónicos, tales como celdas solares de tercera generación, diodos emisores de luz y transistores de efecto de campo [107–111].

Sin embargo, el mismo confinamiento que otorga a estos materiales su carácter ajustable tiende también a localizar las funciones de onda electrónicas, reduciendo drásticamente la movilidad de portadores y dificultando la extracción eficiente de carga. En consecuencia, los sólidos de NPs presentan una naturaleza inherentemente aislante. Lograr una transición desde esta fase localizada hacia una fase metálica deslocalizada constituye, por tanto, un objetivo central tanto desde el punto de vista fundamental como aplicado.

Diversos métodos experimentales han sido desarrollados con este propósito, entre ellos la deposición por capas atómicas (ALD) [112], la percolación sustitutiva [113], el dopaje químico [114, 115] y el fotodopaje [116]. Estas técnicas incrementan el acoplamiento entre NPs y permiten atravesar la transición metal-aislante mediante el aumento de la energía cinética efectiva $t$ o la reducción del desorden $W$. Sin embargo, incluso en los casos en que la fase metálica es alcanzada, las movilidades electrónicas medidas siguen siendo relativamente bajas [112]. Este hecho indica que, además del desorden estructural, existen mecanismos intrínsecos de localización asociados a las interacciones electrón–electrón, entre ellos el bloqueo de Coulomb.

El bloqueo de Coulomb se manifiesta cuando el número total de electrones en una NP se aproxima a un valor entero bien definido. En este régimen, la adición o remoción de un electrón implica un costo energético finito asociado a la repulsión coulombiana y a la capacitancia efectiva de la NP, lo que suprime los procesos de transporte por saltos entre NPs y reduce la movilidad electrónica. Cabe destacar que una NP puede albergar múltiples electrones distribuidos en distintos niveles cuánticos; el bloqueo de Coulomb no implica una prohibición estricta de la doble ocupación de un orbital, sino la penalización energética de las fluctuaciones del número total de carga. En el lenguaje del modelo de Hubbard, este efecto es análogo a la apertura de un gap de Mott para llenados enteros, generalizado aquí a un contexto multiorbital y desordenado. En la práctica, tanto el confinamiento cuántico como el bloqueo de Coulomb actúan de manera conjunta limitando la conductividad de los sólidos nanoparticulados.

El estudio desarrollado en colaboración con el grupo del Dr. Zimanyi propone unificar la descripción de estos sistemas mediante un enfoque teórico basado en la física de Mott–Hubbard

con desorden. Para ello, se combinaron dos métodos complementarios: el simulador jerárquico de transporte HiNTS, desarrollado en UCD, y la DMFT, implementada en nuestro grupo. Mientras que HiNTS describe correctamente la fase localizada, dominada por saltos térmicamente activados entre NPs, la DMFT permite abordar la fase deslocalizada metálica en términos de un modelo de Hubbard multiorbital.

## 8.2. Fase localizada: simulaciones HiNTS y comparación con experimentos

En la fase localizada, los portadores se desplazan mediante procesos de salto térmicamente activados entre nanopartículas (NPs) vecinas. Para describir este régimen se empleó el simulador jerárquico de transporte HiNTS, un paquete computacional que implementa un esquema extendido de Monte Carlo cinético (KMC) (véase el material suplementario del artículo [102]), diseñado para modelar el transporte electrónico en sólidos nanoparticulados con distintos grados de desorden estructural y energético.

El método HiNTS parte de la determinación de los niveles electrónicos individuales de cada NP a partir de un modelo de bandas parametrizado para el material base (en este caso PbSe). Sobre esta base se construye una superred tridimensional de NPs cuyos diámetros se distribuyen según una función gaussiana. La interacción coulombiana local se modela mediante una energía de carga dependiente del número de electrones en cada NP, definida como

$$E_C(n) = n\,\Sigma^0 + \frac{n(n-1)}{2}\,\Sigma, \tag{8.1}$$

donde $n$ representa el número total de electrones presentes en la NP luego de la adición de un nuevo electrón. El primer término, $\Sigma^0$, corresponde al costo electrostático asociado a cargar una NP inicialmente neutra, mientras que $\Sigma$ cuantifica la repulsión coulombiana con los $(n-1)$ electrones previamente alojados. La energía de carga $E_C$ se calcula empleando el método híbrido empírico–perturbativo propuesto en la Ref. [117].

El transporte electrónico se describe mediante tasas de transición del tipo Miller–Abrahams, que incorporan procesos de salto asistidos por fonones y, cuando la diferencia de energía entre los estados inicial y final es menor que la energía de hibridización, transiciones no activadas de carácter metálico. A partir de estas tasas, el algoritmo de Monte Carlo evalúa la movilidad electrónica en presencia de un campo eléctrico débil, una vez alcanzado el régimen estacionario.

Cabe enfatizar que, por su propia construcción, HiNTS asume desde el inicio que los portadores permanecen localizados en nanopartículas individuales y que el transporte ocurre mediante procesos de salto incoherente entre sitios. En particular, el método no incorpora estados electrónicos extendidos ni una descripción en términos de bandas o funciones de Green,

por lo que no puede capturar la emergencia de una fase metálica caracterizada por portadores deslocalizados. Si bien HiNTS describe de manera precisa los regímenes aislantes dominados por el desorden (tipo Anderson), por las interacciones electrón–electrón (bloqueo de Coulomb o Mott granular), así como los cruces entre distintos mecanismos de salto, su dominio de validez queda restringido al régimen localizado. Esta limitación motiva la necesidad de complementar el análisis con un enfoque teórico capaz de describir estados deslocalizados, como la teoría de campo medio dinámico (DMFT), que se introduce en la siguiente sección.

La Figura 8.1 muestra los resultados obtenidos para láminas nanoparticuladas de PbSe, superpuestos con las mediciones experimentales de Kang *et al.* [118]. En dichos experimentos, el diámetro medio de las NPs se varió sistemáticamente manteniendo constante la densidad volumétrica de carga. Se observa una notable coincidencia cuantitativa entre los datos experimentales y las simulaciones, lo que valida la capacidad de HiNTS para describir el transporte en el régimen fuertemente localizado.

Figura 8.1.: Resultados computacionales obtenidos con el simulador HiNTS comparados con las mediciones experimentales de Kang *et al.* [118] para láminas nanoparticuladas de PbSe con ligante EDT (1,2-etanoditiol). La densidad volumétrica de electrones es 0,0016 $e/\mathrm{nm}^3$, la longitud del ligante es 0,5 nm y la temperatura es $T = 200$ K.

La tendencia global creciente de la movilidad con el diámetro $d$ puede atribuirse a dos efectos complementarios: (i) al aumentar $d$, los portadores requieren un menor número de saltos para atravesar el material, y (ii) la dispersión energética inducida por el desorden de tamaños disminuye, dado que la dependencia de los niveles electrónicos con el diámetro se suaviza para nanopartículas más grandes. Sobre esta tendencia general se superpone una modulación no monótona —con un patrón máximo–mínimo–máximo— centrada alrededor de $n = 1$. Este comportamiento se interpreta como una manifestación directa del bloqueo de Coulomb: para llenados enteros, la repulsión interelectrónica suprime el transporte, generando un mínimo en la

Figura 8.2.: Resultados obtenidos con el simulador HiNTS en la fase localizada por desorden para sólidos nanoparticulados de PbSe con diámetro fijo ($6{,}6 \pm 0{,}3$ nm) y temperatura $T = 80$ K.

Figura 8.3.: Dependencia del gap de activación $\Delta$ con la intensidad del desorden $W$ para sólidos nanoparticulados de PbSe. Los círculos rojos corresponden a $n = 1$ (llenado entero) y los azules a $n = 1 + \delta$ con $\delta = 0{,}001$. Para $n = 1$, el gap de Mott $\Delta/E_C \approx 1$ se mantiene hasta $W_c^{(\mathrm{Mott})}/2t \approx 3{,}5$, mientras que para $n = 1 + \delta$ el gap desaparece en $W_c^{(\mathrm{MIT})}/2t \approx 1{,}5$.

movilidad, mientras que para llenados no enteros la movilidad se ve relativamente favorecida.

Sin embargo, la variación del diámetro no solo modifica el llenado electrónico, sino que también altera parámetros cinéticos del sistema, tales como la energía de hibridización inter–NP, las tasas de salto entre sitios y el número efectivo de saltos requeridos para atravesar la muestra. Con el fin de aislar el efecto puramente electrónico, se realizaron simulaciones adicionales manteniendo fijo el diámetro y variando exclusivamente el llenado $n$. Los resultados, presentados en la Figura 8.2, evidencian una caída abrupta de la movilidad al aproximarse a $n = 1$. En estas condiciones, al eliminar las variaciones geométricas y de desorden asociadas al tamaño, la supresión del transporte puede atribuirse inequívocamente a la repulsión coulombiana, revelando que el bloqueo de Coulomb controla la dinámica de los portadores incluso dentro de la fase localizada por desorden.

La comparación entre las Figuras 8.1 y 8.2 permite distinguir claramente los efectos cinéticos de aquellos de origen puramente electrónico. Mientras que la primera refleja un incremento aparente de la movilidad con el tamaño de las NPs, la segunda demuestra que, al fijar la geometría y el desorden estructural, la movilidad presenta un mínimo pronunciado en los llenados enteros debido al bloqueo de Coulomb. De este modo, al barrer el llenado electrónico a través de $n = 1$ dentro de la fase localizada por desorden, el sistema atraviesa un régimen dominado por la localización de tipo Mott y luego retorna a un régimen controlado principalmente por el desorden para $n > 1$.

Finalmente, se analizó la robustez de la fase localizada frente al desorden. La Figura 8.3 muestra la evolución del gap de activación $\Delta$ con la intensidad del desorden $W$[1], para $n = 1$ y $n = 1 + \delta$ con $\delta = 0{,}001$. Para $n = 1$, el gap inicial es de naturaleza Mott y se mantiene aproximadamente constante ($\Delta/E_C \approx 1$) hasta un desorden crítico $W_c^{(\mathrm{Mott})}/2t \approx 3{,}5$. Por encima de este valor, el gap se reduce abruptamente y el sistema cruza hacia una fase localizada dominada por el desorden (tipo Anderson). En contraste, para $n = 1 + \delta$, el gap disminuye progresivamente y se anula en $W_c^{(\mathrm{MIT})}/2t \approx 1{,}5$, señalando la deslocalización de los estados electrónicos y el cruce hacia un régimen conductor.

En conjunto, estos resultados ponen de manifiesto que la localización inducida por interacciones (bloqueo de Coulomb o Mott) y la localización por desorden (Anderson) constituyen límites continuos de un mismo mecanismo de supresión del transporte en sólidos nanoparticulados de PbSe. En este sentido, $W_c^{(\mathrm{Mott})}$ señala el límite de estabilidad del aislante dominado por interacciones, mientras que $W_c^{(\mathrm{MIT})}$ marca la desaparición del gap y la transición hacia un régimen de estados deslocalizados y transporte no activado a llenado no entero. Esta continuidad

[1]En el contexto de las simulaciones HiNTS, el parámetro de desorden $W$ cuantifica la dispersión energética efectiva de los niveles electrónicos locales de las nanopartículas, originada principalmente en la distribución de tamaños y en las fluctuaciones electrostáticas del entorno. En la práctica, $W$ se implementa como el ancho de la distribución de energías locales que entra en las tasas de transición tipo Miller–Abrahams, y controla la competencia entre localización por desorden y transporte asistido por salto.

anticipa que la física del bloqueo de Coulomb persiste incluso dentro de la fase metálica, como se discutirá en la siguiente sección mediante la formulación DMFT.

## 8.3. Fase deslocalizada: descripción mediante DMFT multiorbital

El modelo de Hubbard constituye una herramienta versátil para describir la competencia entre localización y deslocalización en sistemas electrónicos fuertemente correlacionados. En el contexto de los sólidos nanoparticulados, cada NP puede interpretarse como un "sitio efectivo" del modelo, con un conjunto de niveles electrónicos cuánticamente confinados. Esta analogía permite estudiar la fase metálica deslocalizada mediante la DMFT, complementando el enfoque de HiNTS que, como se mostró en la sección anterior, describe el régimen de transporte localizado por desorden e interacciones.

### 8.3.1. Motivación del modelo multiorbital con desorden

A diferencia de los sistemas atómicos, las NPs semiconductoras presentan múltiples niveles electrónicos casi degenerados, correspondientes a los orbitales confinados dentro de cada partícula. Por ejemplo, en NPs de PbSe los primeros niveles de conducción exhiben una degeneración de multiplicidad ocho, correspondiente a cuatro orbitales degenerados con degeneración de espín [119]. Para capturar este aspecto esencial, resulta necesario adoptar un modelo de Hubbard multiorbital.

Además, los sólidos nanoparticulados presentan inevitablemente cierto grado de desorden, tanto en el tamaño y forma de las NPs como en su disposición espacial. En la formulación utilizada en este trabajo, el desorden se introdujo a través de una distribución aleatoria de energías locales de sitio $w_i$, distribuidas en el intervalo $[-W, W]$ (desorden diagonal). La combinación de degeneración orbital, repulsión de Coulomb y desorden estructural reproduce de manera apropiada las condiciones de los sólidos nanoparticulados experimentales, permitiendo explorar el papel relativo de la interacción ($U$) y del desorden ($W$) en la transición metal–aislante.

### 8.3.2. Modelo y formulación de DMFT

El Hamiltoniano adoptado es una versión multiorbital del modelo de Hubbard con desorden dada por,

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij\rangle,a,\sigma} c^{\dagger}_{ia\sigma} c_{ja\sigma} + \sum_{i,a,\sigma} (w_i - \mu)\, n_{ia\sigma} + U \sum_{i,a} n_{ia\uparrow} n_{ia\downarrow} + U \sum_{i,a\neq b,\sigma,\sigma'} n_{ia\sigma} n_{ib\sigma'}, \tag{8.2}$$

donde $i, j$ son índices de sitio, $a, b = 1, 2, 3, 4$ denotan los orbitales degenerados, $n_{ia\sigma} = c^{\dagger}_{ia\sigma} c_{ia\sigma}$ es el número de electrones con espín $\sigma$ en el orbital $a$ del sitio $i$, $\mu$ es el potencial químico, $t$ es la amplitud de salto entre primeros vecinos, y $U$ es la interacción de Coulomb local. Tal como se explicó antes, el desorden se introdujo a través de las energías locales de sitio aleatorias $w_i$, distribuidas en el intervalo $[-W, W]$. En la interacción se despreciaron los términos de intercambio de Hund ($J = 0$) tomando una repulsión Coulombiana uniforme entre orbitales iguales y distintos. Esta elección permite aislar el papel de la repulsión local total y del desorden, evitando la complejidad adicional asociada a la física de Hund.

El efecto local del desorden se incorporó a través del promedio aritmético de la densidad local de estados. Este esquema, denominado CPA–DMFT, resulta adecuado para el propósito de este trabajo: estudiar el efecto del desorden sobre la movilidad del estado metálico correlacionado y sobre la evolución del gap en el llenado entero $n = 1$. Esta formulación, sin embargo, no captura la localización de Anderson ni otros fenómenos asociados a fluctuaciones espaciales del desorden. Tal como se discute en la Sección 2.4, se han propuesto extensiones de la DMFT —como la *Teoría del Medio Típico* (TMT) y la *DMFT estadística* (*statDMFT*)— que reemplazan los promedios aritméticos por geométricos, permitiendo describir la transición de Mott–Anderson de forma más completa. Aunque estas variantes implican un costo computacional significativamente mayor, representan una vía prometedora para profundizar en la comprensión de los efectos combinados de interacción y desorden en sólidos nanoparticulados.

Se consideraron energías locales de sitio $w_i$ estáticas, no correlacionadas entre sí, extraídas de una distribución de probabilidad uniforme dada por,

$$P(w_i) = \frac{1}{2W}\,\Theta(W - |w_i|), \tag{8.3}$$

donde $\Theta$ representa la función escalón de Heaviside. A lo largo de este estudio se trabajó en el régimen $W \ll U$, en el cual la aproximación CPA–DMFT constituye una descripción adecuada, ya que el desorden actúa como una perturbación débil frente a las correlaciones electrón–electrón dominantes.

En DMFT para sistemas con desorden, cada sitio desordenado se caracteriza por una autoenergía local $\Sigma_i(i\omega_n)$. El problema completo se mapea entonces a un conjunto de problemas de impureza de Anderson independientes, cada uno acoplado a un baño de conducción efectivo que se determina de manera autoconsistente.

El modelo se implementó sobre una red de Bethe en el límite de conectividad infinita, para la cual la función de hibridización se expresa como,

$$\Delta(i\omega_n) = t^2\, G_{\mathrm{avg}}(i\omega_n), \tag{8.4}$$

donde $G_{\mathrm{avg}}(i\omega_n)$ es la función de Green local promediada sobre los sitios desordenados. Esta

función se obtiene a partir de la condición de autoconsistencia,

$$G_{\text{avg}}(i\omega_n) = \left\langle \frac{1}{i\omega_n + \mu - w_i - \Delta(i\omega_n) - \Sigma_i(i\omega_n)} \right\rangle, \tag{8.5}$$

donde el símbolo $\langle \cdots \rangle$ indica el promedio aritmético sobre la distribución de energías locales $w_i$. Dado que el modelo considerado posee degeneración cuádruple (cuatro orbitales por sitio), y por lo tanto una alta demanda computacional, el promedio se estimó numéricamente utilizando un conjunto de diez valores aleatorios de $w_i$ en cada ciclo de autoconsistencia.

Las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el método de Monte Carlo de tiempo continuo (CT-QMC) [67]. Las funciones espectrales en el eje real se obtuvieron posteriormente mediante continuación analítica utilizando el método de Máxima Entropía (MaxEnt) [68].

La movilidad electrónica se obtuvo a partir del cálculo de la conductividad DC $\sigma$, variando la ocupación electrónica promedio $n$ mediante ajustes del potencial químico $\mu$. La conductividad DC se evaluó utilizando la fórmula de Kubo, cuya expresión general es,

$$\sigma = \sigma_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \; D(\varepsilon)\, A^2(\omega, \varepsilon) \left( -\frac{df}{d\omega} \right), \tag{8.6}$$

donde $D(\varepsilon)$ es la densidad de estados no interactuante (asumida semicircular en este trabajo), $A(\omega, \varepsilon)$ es la función espectral, $f(\omega)$ es la función de Fermi y $\sigma_0$ un factor de normalización que fija las unidades de la conductividad. Una vez obtenida la conductividad en función del número medio de electrones por NP, $\sigma(n)$, la movilidad electrónica se calculó mediante la relación,

$$\mu_e(n) = \frac{\sigma(n)}{n}, \tag{8.7}$$

donde $\mu_e(n)$ representa la movilidad efectiva de los portadores como función del llenado electrónico.

### 8.3.3. Resultados y discusión

A continuación se presentan los resultados obtenidos para la movilidad electrónica y el potencial químico del modelo de Hubbard multiorbital a temperatura fija $T/t = 0{,}02$. Los parámetros adoptados corresponden a un valor de interacción $U = E_C = 100$ meV y una amplitud de salto entre NPs $t = 7$ meV, lo que implica una razón $U/2t = 7$. Estos valores reproducen de manera cuantitativa los parámetros experimentales del sistema de PbSe mostrados en la figura 8.2, por lo que el modelo puede considerarse una representación efectiva de dicho sólido nanoparticulado.

La Figura 8.4 muestra la movilidad electrónica $\mu_e$ y el potencial químico $\mu$ en función del

llenado electrónico $n$, tanto para el caso limpio ($W = 0$) como para un desorden finito ($W/2t = 1$). Dado que este valor satisface $W/2t < W_c^{(\mathrm{MIT})}/2t \approx 1{,}5$, el sistema permanece dentro de la fase deslocalizada. En el caso sin desorden, el potencial químico exhibe un salto pronunciado en $n = 1$, señalando la apertura de un gap de Mott. Este resultado es particularmente significativo, ya que el cálculo de DMFT predice una fase localizada en $n = 1$, correspondiente a una ocupación de 1/8 de la banda total al considerar los cuatro orbitales degenerados. Esto pone de manifiesto que el criterio determinante para la localización de tipo Mott no es el llenado total de la banda, sino el llenado entero por sitio efectivo. En contraste, los enfoques de campo medio estático o las teorías de bandas tradicionales para PbSe predicen la aparición del aislante de Mott únicamente por encima del llenado mitad, correspondiente a $n = 4$. Por lo tanto, este modelo confirma que el sólido de PbSe nanoparticulado se comporta como un sistema de Mott multiorbital, donde las correlaciones electrónicas se manifiestan ya en los orbitales degenerados de conducción.

La existencia del gap de Mott tiene un impacto directo sobre el transporte: la movilidad $\mu_e$ presenta un mínimo pronunciado cuando el llenado cruza $n = 1$. Esta depresión en la movilidad constituye la firma del bloqueo de Coulomb en la fase metálica, análogo al observado en la fase localizada (mostrado en la figura 8.2). El resultado muestra que las correlaciones electrónicas no solo inducen un estado aislante en $n = 1$, sino que además suprimen la movilidad incluso dentro de la fase metálica adyacente, confirmando la persistencia del bloqueo de Coulomb a través de la transición metal–aislante.

Figura 8.4.: Resultados de DMFT para $U/2t = 7$ y $T/t = 0{,}02$. La movilidad $\mu_e$ (curva inferior) presenta un mínimo pronunciado en $n = 1$, asociado a la apertura del gap de Mott reflejada en el salto del potencial químico $\mu$ (curva superior). El comportamiento confirma la persistencia del bloqueo de Coulomb en la fase metálica.

Un resultado destacado del estudio es que las tendencias observadas en el caso limpio persisten incluso en presencia de desorden moderado. El gap de Mott (salto de $\mu$ en $n = 1$) se reduce levemente, pero se mantiene robusto mientras $W/2t = 1 \ll W_c^{(\mathrm{Mott})}/2t \approx 3{,}5$. En

cambio, la movilidad se ve afectada de manera más significativa: el mínimo en $n = 1$ se amplía y su profundidad aumenta, reflejando la competencia entre la localización por interacción y la localización inducida por desorden. Este efecto es más fuerte en bajas densidades, donde la energía de Fermi es comparable con la amplitud del desorden y, por tanto, su influencia relativa es mayor.

El método CPA–DMFT utilizado en este trabajo no captura explícitamente la localización de Anderson, ya que promedia el desorden de manera aritmética. Sin embargo, la robustez de las tendencias obtenidas indica que la descripción media del desorden es suficiente para reproducir los efectos dominantes en el régimen $W \ll U$. Extensiones del método, como la Teoría del Medio Típico (TMT) o la DMFT estadística, podrían emplearse en el futuro para analizar la transición de Mott–Anderson de manera más completa en el contexto de los sólidos nanopartículados.

## 8.4. Conclusiones

Integrando los barridos complementarios de HiNTS (fase localizada) y DMFT (fase deslocalizada), se construyó el diagrama de fases cualitativo en el plano $(W, n)$ mostrado en la Figura 8.5. El panorama que emerge distingue dos mecanismos de supresión del transporte en sólidos de NPs:

- **Localización dominada por interacciones en la vecindad de $n = 1$:** Cerca del llenado entero, HiNTS revela una fase localizada con un gap de activación de origen Mott ($\Delta/E_C \approx 1$) que se mantiene robusto hasta un desorden crítico $W_c^{(\mathrm{Mott})}/2t \approx 3{,}5$ (Fig. 8.3). Desde la fase deslocalizada, DMFT reproduce la firma complementaria de este fenómeno: un salto del potencial químico en $n = 1$, que evidencia la apertura de un gap de Mott, acompañado por un mínimo pronunciado de la movilidad al cruzar dicho llenado (Fig. 8.4).
- **Transición inducida por desorden para $n \neq 1$:** Al alejarse ligeramente del llenado entero ($n = 1 + \delta$), HiNTS muestra que el gap decrece de modo continuo y colapsa en $W_c^{(\mathrm{MIT})}/2t \approx 1{,}5$, señalando la deslocalización de los estados electrónicos y el cruce hacia un régimen conductor (Fig. 8.3). En concordancia, DMFT indica que, aun en presencia de desorden moderado, la depresión de la movilidad asociada a $n = 1$ persiste y puede intensificarse, reflejando la competencia entre correlaciones locales y desorden en el entorno metálico.

En conjunto, estos resultados muestran que la localización por interacciones (bloqueo de Coulomb/Mott) y la localización por desorden (Anderson) constituyen límites continuos de un mismo escenario en sólidos de PbSe, y que las firmas del bloqueo de Coulomb—en particular, los mínimos de movilidad en llenados enteros—persisten también en la fase metálica. El acuerdo cuantitativo entre simulaciones y datos experimentales en películas de PbSe (y la consistencia con

tendencias reportadas en películas de CdSe [115]) refuerza la utilidad de un marco de Hubbard desordenado para reinterpretar los mecanismos de transporte en celdas solares nanoparticuladas.

Desde el punto de vista práctico, el diagrama sugiere rutas concretas para optimizar el desempeño optoelectrónico: (i) aumentar $t$ (por intercambio de ligantes y recocido que mejoren el solapamiento de funciones de onda), (ii) reducir $W$ (disminuyendo la dispersión de tamaños/energías y mitigando trampas), y (iii) disminuir $E_C$ (mediante ingeniería dieléctrica). Estas estrategias desplazan al sistema hacia la región metálica del diagrama, alejándolo de los llenados enteros donde el bloqueo de Coulomb suprime la movilidad.

Figura 8.5.: Diagrama de fases cualitativo en el plano $(W, n)$ para sólidos de NPs en el régimen $U \gg W$. Se distinguen las regiones correspondientes a la fase localizada por Mott (*Mott-localized*), la fase donde la localización ocurre por desorden *Disorder-localized* y la fase metálica deslocalizada (*Metal*), junto con las líneas críticas $W_c^{(\mathrm{Mott})}$ (en $n = 1$) y $W_c^{(\mathrm{MIT})}$ (para $n \neq 1$). Las líneas rojas a trazos indican los barridos correspondientes a las figuras: (1)–(2) variaciones de tamaño/llenado; (3a–3b) barridos en $W$ a $n = 1$ y $n = 1 + \delta$; (4a–4b) resultados DMFT desde la fase deslocalizada.

# 9. Conclusiones generales

En esta tesis se estudió cómo la competencia entre itinerancia electrónica, correlaciones locales y desorden da lugar a fenómenos emergentes en sistemas fuertemente correlacionados, con especial énfasis en propiedades de transporte y magnetismo. A lo largo del trabajo, el modelo de Hubbard —en distintas extensiones y contextos físicos— funcionó como un laboratorio teórico unificador, mientras que la teoría de campo medio dinámico (DMFT) permitió tratar de manera no perturbativa los efectos de correlación local y vincular, en un mismo marco, propiedades espectrales, magnéticas y de transporte.

La primera parte de la tesis se centró en el modelo de Hubbard antiferromagnético bajo campo magnético. Allí se mostró que la magnetorresistencia y la respuesta de transporte no pueden entenderse únicamente en términos de una imagen de bandas o de un escenario de partículas independientes, sino que están profundamente controladas por la estructura espectral local generada por las correlaciones electrónicas. En particular, el análisis detallado de la dependencia con temperatura, campo magnético y dopaje puso de manifiesto la coexistencia de escalas de energía asociadas a fluctuaciones de carga y de espín, así como el rol central de la reconstrucción espectral en la aparición de respuestas de transporte no triviales. El estudio del metamagnetismo local permitió además identificar regímenes en los que pequeñas variaciones del campo inducen respuestas magnéticas abruptas, reflejando la proximidad entre fases con orden magnético distinto y la fuerte sensibilidad del sistema a perturbaciones externas.

Un resultado central de la tesis emerge del análisis de la espintrónica en el modelo de Hubbard antiferromagnético. Allí se identificó un mecanismo mínimo, de origen puramente correlacionado, capaz de generar transporte de carga polarizado en espín en antiferromagnetos colineales estructuralmente convencionales. A diferencia de los mecanismos habituales en espintrónica, que suelen apoyarse en simetrías cristalinas específicas o en texturas magnéticas no colineales, la polarización de la conductividad DC se mostró como consecuencia directa de la ruptura conjunta de dos restricciones de simetría independientes: la simetría partícula–hueco (o su extensión PHsp a llenado mitad en presencia de campo) y la equivalencia dinámica entre subredes asociada a la simetría combinada $PT$. Mientras cualquiera de estas simetrías se mantenga, la estructura de la conductividad impone una compensación exacta entre canales de espín, forzando $\sigma_\uparrow = \sigma_\downarrow$. La polarización de corriente aparece únicamente cuando ambas restricciones se rompen simultáneamente, estableciendo un principio de control por simetrías

que vincula de manera directa propiedades espectrales locales con la respuesta de transporte macroscópica. Este resultado proporciona una ruta conceptual simple para diseñar escenarios de espintrónica antiferromagnética basados en correlaciones electrónicas, sin recurrir a ingredientes estructurales exóticos.

La segunda parte de la tesis exploró cómo las ideas desarrolladas en el contexto del modelo de Hubbard se proyectan sobre sistemas más complejos y de interés experimental. En el caso de los iridatos $Sr_2IrO_4$ y $Sr_3Ir_2O_7$, se analizó la evolución espectral inducida por el dopaje en la transición magnética, mostrando cómo la reorganización del peso espectral y la modificación de las excitaciones de baja energía acompañan el colapso progresivo del estado antiferromagnético y la aparición de una respuesta metálica. Este análisis refuerza la idea de que la física de Mott y la del magnetismo itinerante no constituyen regímenes disjuntos, sino que se conectan de manera continua a través de una reconstrucción espectral gobernada por correlaciones locales.

En el caso de los sólidos de nanopartículas, se estudió la transición metal–aislante impulsada por el bloqueo de Coulomb y el desorden, combinando simulaciones de tipo HiNTS para la fase localizada con una descripción mediante DMFT multiorbital para la fase deslocalizada. Este enfoque permitió unificar, dentro de un mismo marco conceptual, la física del confinamiento cuántico y la del bloqueo de Coulomb con la fenomenología de la transición de Mott en sistemas extendidos. Los resultados muestran que, aun en sistemas con fuerte desorden estructural y escalas de energía dominadas por efectos capacitivos, la competencia entre interacción y deslocalización puede describirse con herramientas conceptualmente cercanas a las empleadas en modelos de electrones fuertemente correlacionados en redes periódicas.

En conjunto, los distintos capítulos de la tesis ponen de manifiesto un hilo conductor claro: la estructura espectral local, moldeada por las correlaciones electrónicas, actúa como el eslabón fundamental entre el microscopio teórico (Hamiltonianos efectivos y autoenergías locales) y las respuestas macroscópicas observables (magnetización, magnetorresistencia, conductividad y polarización de espín). La DMFT emerge así no sólo como una herramienta técnica, sino como un marco conceptual que permite rastrear de manera transparente cómo las propiedades locales de muchos cuerpos se traducen en respuestas colectivas medibles.

Finalmente, este trabajo abre varias perspectivas naturales para desarrollos futuros. Entre ellas se destacan la inclusión de correlaciones no locales mediante extensiones de DMFT de clúster, el tratamiento explícito del acoplamiento espín–órbita en modelos multiorbitales realistas, la incorporación de desorden más allá de esquemas de medio efectivo, y la conexión sistemática con cálculos de primeros principios mediante procedimientos de wannierización. En el contexto de la espintrónica antiferromagnética, los resultados obtenidos sugieren además explorar geometrías y heteroestructuras donde la ruptura controlada de simetrías permita modular eficientemente la polarización de corriente, tendiendo un puente concreto entre la física de sistemas fuertemente correlacionados y el diseño de dispositivos funcionales.

# A. Relación entre las fases paramagnética y antiferromagnética del modelo de Hubbard

## A.1. Función de Green local en el modelo paramagnético

En la fase paramagnética, en la que todos los sitios de la red son equivalentes, el Hamiltoniano del modelo de Hubbard se escribe como,

$$\mathcal{H}_{\mathrm{PM}} = -t \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} \left( c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + c^{\dagger}_{j\sigma} c_{i\sigma} \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}, \tag{A.1}$$

Transformando Fourier el término cinético mediante las siguientes relaciones,

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}\, c_{\mathbf{k}\sigma} \qquad c^{\dagger}_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'\in \mathrm{BZ}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma}, \tag{A.2}$$

obtenemos,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\mathrm{PM}}_{\mathrm{cin}} &= -t \sum_{\langle ij\rangle,\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i}\, e^{\,i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j}\; c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \mathrm{h.c.} \\ &= -t \sum_{\sigma} \; \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{i} \sum_{\boldsymbol{\delta}\in \mathrm{p.v.}} e^{\,-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} e^{\,i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i+\boldsymbol{\delta})} + \mathrm{h.c.}, \end{aligned}$$

en donde $\boldsymbol{\delta}$ es un vector que recorre todos los enlaces $\langle ij\rangle$ entre primeros vecinos (p.v). Reordenando términos, nos queda,

$$\mathcal{H}^{\mathrm{PM}}_{\mathrm{cin}} = -\frac{t}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{i} e^{\,i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{\,i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} + \mathrm{h.c.}.$$

Usando que,

$$\sum_{i} e^{\,i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} = N\, \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'},$$

Resulta,

$$\mathcal{H}_{\text{cin}}^{\text{PM}} = \sum_{\mathbf{k}\in\text{BZ},\,\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \tag{A.3}$$

con,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\,t \sum_{\boldsymbol{\delta}\in\text{p.v.}} e^{\,i\,\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}, \tag{A.4}$$

la relación de dispersión de la red. De donde se sigue que la función de Green es,

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(z_\sigma) = \frac{1}{z_\sigma - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \qquad \Longrightarrow \qquad G_{\text{loc},\,\sigma}(z_\sigma) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\in\text{BZ}} \frac{1}{z_\sigma - \varepsilon_{\mathbf{k}}}\,. \tag{A.5}$$

## A.2. Función de Green en el modelo antiferromagnético

En el caso antiferromagnético (2.35), el término cinético del modelo de Hubbard viene dado por,

$$\mathcal{H}_{\text{cin}}^{\text{AF}} = -\,t \sum_{i\,\in\text{A},\,j\,\in\text{B},\,\sigma} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} + b_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}\right), \tag{A.6}$$

en donde, $\mathbf{R}_i \in \text{A}$, $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta} \in \text{B}$, con $\boldsymbol{\delta}$ el vector genérico entre primeros vecinos $\langle ij\rangle$, y A, B las subredes complementarias del sistema.

Transformando Fourier mediante las relaciones,

$$a_{i\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{k}\in\text{RBZ}} e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}\, a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \qquad b_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{k}'\in\text{RBZ}} e^{\,i\,\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j}\, b_{\mathbf{k}'\sigma}, \tag{A.7}$$

resulta,

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{cin}}^{\text{AF}} &= -\,t \sum_{i\,\in\text{A},\,j\,\in\text{B},\,\sigma} \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}\, e^{\,i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j}\; a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'\sigma} + \text{h.c.} \\
&= -\,t \sum_{\sigma} \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'\sigma} \sum_{i\,\in\text{A}} e^{\,i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \sum_{\boldsymbol{\delta}\in\text{p.v.}} e^{\,i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\delta}} + \text{h.c.}
\end{aligned}$$

Usando que,

$$\sum_{i\,\in\text{A}} e^{\,i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} = N/2\,\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \qquad \text{y que,} \qquad \varepsilon_{\mathbf{k}} = -\,t \sum_{\boldsymbol{\delta}\in\text{p.v.}} e^{\,i\,\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}},$$

resulta,

$$\mathcal{H}_{\text{cin}}^{AF} = \sum_{\mathbf{k}\in\text{RBZ},\,\sigma} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{*} b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma}\right) \tag{A.8}$$

Utilizando los espinores definidos en (2.36),

$$\Psi_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = \left(a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger},\, b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\right), \qquad \Psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\sigma} \\ b_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix},$$

se tiene que,

$$\mathcal{H}_{\text{cin}}^{AF} = \sum_{\mathbf{k}\,\in\,\text{RBZ},\sigma} \Psi_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^{*} & 0 \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}\sigma}. \tag{A.9}$$

Y la función de Green adopta en este caso la siguiente estructura matricial,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) &= \left[ \begin{pmatrix} z_{A\sigma} & 0 \\ 0 & z_{B\sigma} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^{*} & 0 \end{pmatrix} \right]^{-1} \\ &= \frac{1}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - |\varepsilon_{\mathbf{k}}|^2} \begin{pmatrix} z_{B\sigma} & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^{*} & z_{A\sigma} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} G_{\mathbf{k}\sigma}^{AA} & G_{\mathbf{k}\sigma}^{AB} \\ G_{\mathbf{k}\sigma}^{BA} & G_{\mathbf{k}\sigma}^{BB} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{A.10}$$

En el espacio real se define, de manera general,

$$G_{ij,\sigma}(z) \equiv G_{\sigma}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, z) = \frac{1}{N_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{\,i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}\, G_{\mathbf{k}\sigma}(z)$$

Luego, usando nuestra convención, donde $\mathbf{R}_i \in$ A, $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta} \in$ B, podemos definir,

$$G_{\text{loc},\,\sigma}^{AA}(z) \equiv G_{ii,\sigma}(z) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in\text{RBZ}} G_{\mathbf{k}\sigma}^{AA}(z), \qquad G_{\text{loc},\,\sigma}^{BB}(z) \equiv G_{jj,\sigma}(z) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in\text{RBZ}} G_{\mathbf{k}\sigma}^{BB}(z), \tag{A.11}$$

que son funciones de Green locales, miden la amplitud de probabilidad de que una partícula vuelva al mismo sitio luego de propagarse sobre la red. Estas funciones de Green son las que entran en el ciclo auto-consistente de DMFT (2.42).

Si $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es real, como lo es en la mayoría de las redes, resulta $G_{\mathbf{k}\sigma}^{AB} = G_{\mathbf{k}\sigma}^{BA}$[1]. A partir de esta función podemos definir una familia de funciones de Green no locales,

$$G_{\boldsymbol{\delta},\,\sigma}^{AB}(z) \equiv G_{ij,\sigma}(z) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in\text{RBZ}} e^{\,i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}\, G_{\mathbf{k}\sigma}^{AB}(z) \tag{A.12}$$

una por cada vector de enlace $\boldsymbol{\delta}$. Estas funciones no locales describen la propagación entre subredes, es decir, la amplitud de que un electrón inicialmente localizado en un sitio de una subred se desplace hacia un sitio de la subred complementaria a través del enlace caracterizado por $\boldsymbol{\delta}$.

En redes isótropas (con el mismo parámetro de red y misma amplitud de salto $t$ en todas las direcciones), estos propagadores terminan siendo iguales por simetría, y es posible definir

[1] Esto es válido siempre que la propagación a primeros vecinos sea simétrica, es decir, que si $\boldsymbol{\delta}$ es un vector de enlace, también lo sea $-\boldsymbol{\delta}$. En tal caso, ir de $A$ a $B$ resulta equivalente a ir de $B$ a $A$. Es decir,

$$\text{Si, } \boldsymbol{\delta} \in \{\boldsymbol{\delta}\} \Rightarrow -\boldsymbol{\delta} \in \{\boldsymbol{\delta}\}, \qquad \varepsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{\,i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} \Big[ \cos(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}) + \cancel{i \sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta})} \Big] = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} \cos(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}) \in \mathbb{R},$$

en donde el término imaginario se anula debido a la simetría por inversión del conjunto de enlaces $\boldsymbol{\delta}$.

una función de Green $G^{AB}$ global. En cambio, en redes anisótropas, por ejemplo con $t_x \neq t_y$, la "$G^{AB}$ global" pierde sentido y se torna necesario distinguir entre propagadores direccionales $G_x^{AB}$, $G_y^{AB}$, etc.

Para establecer la conexión entre el modelo paramagnético y el modelo bipartito es necesario comprender cómo se relacionan las sumas sobre la zona de Brillouin completa con aquellas restringidas a la zona de Brillouin reducida. Esta correspondencia surge de manera natural bajo la condición de anidamiento perfecto (*perfect nesting*), que enlaza los estados electrónicos de ambas representaciones.

## A.3. Condición de anidamiento perfecto (*perfect nesting*)

La formulación bipartita que considera a los sitios de la subred A no equivalentes a los de la subred complementaria B, implica una duplicación de la celdad unidad del sistema, que ahora contiene a dos sitios. En el espacio recíproco esto se traduce en una reducción de la zona de Brillouin, dando lugar a la denominada zona de Brillouin reducida (RBZ).

Una propiedad fundamental de las redes de Bravais bipartitas, es que para cada vector de onda $\mathbf{k}' \in$ BZ/RBZ (que pertenece a la zona de Brillouin completa (BZ), pero se encuentra fuera de zona de Brillouin reducida), existe un vector $\mathbf{k} \in$ RBZ tal que,

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{Q},$$

donde $\mathbf{Q}$ es un vector recíproco de la celda unidad ampliada. Este vector se denomina *vector de orden* del estado antiferromagnético y satisface que,

$$e^{\,i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = \begin{cases} +1, & \text{si } \mathbf{R} \in A, \\ -1, & \text{si } \mathbf{R} \in B. \end{cases}$$

Para la red cúbica (con parámetro de red unitario), por ejemplo, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$.

Para el vector de orden $\mathbf{Q}$ se tiene que,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{\,i(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\cdot\boldsymbol{\delta}} = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{\,i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}\, e^{\,i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\delta}}.$$

Como los vectores $\boldsymbol{\delta}$ conectan sitios de la subred A con sitios de la subred B, se tiene que $e^{\,i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\delta}} = -1$, lo que conduce a la siguiente relación,

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\,\varepsilon_{\mathbf{k}}. \tag{A.13}$$

Esta condición es precisamente la condición de anidamiento perfecto (*perfect nesting*), caracte-

rística de los estados antiferromagnéticos en redes bipartitas con primeros vecinos equivalentes.

Para cualquier suma sobre la zona de Brillouin completa podemos escribir,

$$\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}'\in \mathrm{BZ/RBZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}'}).$$

Si la red es de Bravais bipartita, se tiene que $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{Q}$ y $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}}$, de donde se sigue que,

$$\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \left[ f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f(-\varepsilon_{\mathbf{k}}) \right]. \tag{A.14}$$

Esta relación permite vincular sumas o integrales sobre la zona de Brillouin completa en términos de la zona reducida (y viceversa), y es una herramienta que simplifica el tratamiento de sistemas antiferromagnéticos.

### A.3.1. El modelo paramagnético como caso particular del modelo antiferromagnético

En el modelo antiferromagnético, las funciones de Green locales (A.11), vienen dadas por,

$$G^{AA}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z_{B\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}, \qquad G^{BB}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z_{A\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}.$$

En el caso paramagnético, las subredes se vuelven equivalentes, $z_{A\sigma} = z_{B\sigma} \equiv z$, y resulta,

$$G_{\mathrm{loc},\sigma}(z) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z}{z^2 - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}.$$

En la descripción paramagnética obtuvimos (A.5),

$$G_{\mathrm{loc},\sigma}(z_\sigma) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} \frac{1}{z_\sigma - \varepsilon_{\mathbf{k}}}.$$

Usando la relación (A.14), podemos reescribir esta función como,

$$\begin{aligned} G_{\mathrm{loc},\sigma}(z) &= \frac{2}{2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \left( \frac{1}{z_\sigma - \varepsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{z_\sigma + \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{2\, z_\sigma}{z^2_\sigma - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}} \\ &= \frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z_\sigma}{z^2_\sigma - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}, \end{aligned}$$

demostrando la equivalencia entre ambas descripciones. Nótese que en la segunda línea hemos utilizado que $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es real, que es una condición válida para redes isótropas con invarianza

traslacional.

### A.3.2. Auto-consistencia en DMFT para redes bipartitas

En las ecuaciones de DMFT para redes bipartitas presentadas en el capítulo 2, escribimos las funciones de Green locales como integrales que recorren todo el rango de energías (2.41), aunque como vimos, las funciones de Green en el espacio-k se escriben como sumas restringidas a la zona de Brillouin reducida. Veamos el paso a paso de la equivalencia entre ambas expresiones.

Partamos de la relación (A.14),

$$\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \left[\, f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f(-\varepsilon_{\mathbf{k}}) \,\right],$$

en partícular, si $f$ es una función par de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, es decir, tal que $f(-\varepsilon_{\mathbf{k}}) = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, se tiene que,

$$\sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = 2 \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad \text{si } f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \text{ es par.} \tag{A.15}$$

En DMFT o en dimensión infinita, la auto-energía es local (independiente de $\mathbf{k}$), y la única dependencia con $\mathbf{k}$ de las funciones locales de Green se da través de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$,

$$G^{AA}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z_{B\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}, \qquad G^{BB}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \frac{z_{A\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}.$$

En ambos casos, la suma es sobre una función que depende de $\varepsilon^2_{\mathbf{k}}$, y que por lo tanto es par respecto de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, de modo que, de acuerdo con (A.15), resulta válido reemplazar,

$$\frac{1}{N/2} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{RBZ}} \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}}$$

en estas expresiones, para obtener,

$$G^{AA}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} \frac{z_{B\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}, \qquad G^{BB}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\in \mathrm{BZ}} \frac{z_{A\sigma}}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2_{\mathbf{k}}}.$$

La extensión a integrales en energía por medio de la densidad de estados no interactuante $\rho(\varepsilon)$ resulta directa,

$$G^{AA}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = z_{B\sigma} \int d\varepsilon \, \frac{\rho(\varepsilon)}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2} \qquad G^{BB}_{\mathrm{loc},\sigma}(z_{A\sigma}, z_{B\sigma}) = z_{A\sigma} \int d\varepsilon \, \frac{\rho(\varepsilon)}{z_{A\sigma} z_{B\sigma} - \varepsilon^2}$$

# Bibliografía


[1] N. F. Mott and R. Peierls. Discussion of the paper by de boer and verwey. *Proceedings of the Physical Society*, 49:72, 1937.

[2] N. F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7):416–422, 1949.

[3] N. F. Mott. *Metal-Insulator Transitions*. Taylor and Francis, London, 1990.

[4] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 276(1365):238–257, 1963.

[5] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands: The degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 277(1369):237–259, 1964.

[6] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands: An improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 281(1386):401–419, 1964.

[7] M. C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Physical Review Letters*, 10(5):159–162, March 1963.

[8] J. Kanamori. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3):275–289, September 1963.

[9] D. Vollhardt. From $d = \infty$ to real materials. In *Lecture Notes of the Autumn School on Correlated Electrons: DMFT at 25*. Forschungszentrum Julich, 2018. Available at `https://www.cond-mat.de/events/correl18/manuscripts/vollhardt.pdf`.

[10] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer-Verlag, New York, 1994.

[11] A. Georges. Condensed matter physics with light and atoms: Strongly correlated cold fermions in optical lattices. *arXiv preprint*, cond-mat/0702122, 2007. Preprint available at arXiv.

[12] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68(1):13–125, 1996.

[13] Emanuel Gull, Olivier Parcollet, and Andrew J. Millis. Superconductivity and the pseudogap in the two-dimensional hubbard model. *Physical Review Letters*, 110(21):216405, 2013.

[14] Jan Zaanen and Olle Gunnarsson. Charged magnetic domain lines and the magnetism of high-$t_c$ oxides. *Physical Review B*, 40(10):7391–7394, 1989.

[15] Steven R. White and Douglas J. Scalapino. Density matrix renormalization group study of the striped phase in the 2d t-j model. *Physical Review Letters*, 80(6):1272–1275, 1998.

[16] Douglas J. Scalapino. The case for $d_x^2 - y^2$ pairing in the cuprate superconductors. *Physics Reports*, 250(6):329–365, 1995.

[17] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke, and Martin H. Hettler. Quantum cluster theories. *Reviews of Modern Physics*, 77(3):1027–1080, 2005.

[18] Anton Mazurenko, Cheng-Hsun Chiu, Ge Ji, Maxwell F. Parsons, Márton Kanász-Nagy, Richard Schmidt, Fabian Grusdt, Eugene Demler, Daniel Greif, and Markus Greiner. A cold-atom fermi–hubbard antiferromagnet. *Nature*, 545(7655):462–466, 2017.

[19] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in $la_2cuo_4$ and superconductivity. *Science*, 235(4793):1196–1198, 1987.

[20] Sandro Sorella, G. B. Martins, F. Becca, C. Gazza, L. Capriotti, A. Parola, and E. Dagotto. Superconductivity in the two-dimensional t-j model. *Physical Review Letters*, 88(11):117002, 2002.

[21] B.-X. Zheng, C.-M. Chung, P. Corboz, G. Ehlers, M.-P. Qin, R. M. Noack, H. Shi, S. R. White, S. Zhang, and G. K.-L. Chan. Stripe order in the underdoped region of the two-dimensional hubbard model. *Science*, 358(6367):1155–1160, 2017.

[22] Edwin W. Huang, Christian B. Mendl, Hong-Chen Jiang, Brian Moritz, and Thomas P. Devereaux. Stripe order from the perspective of the hubbard model. *npj Quantum Materials*, 3:22, 2018.

[23] Philippe Corboz. Competing states in the *t-j* model: Uniform *d*-wave state versus stripe state. *Physical Review B*, 90(19):195114, 2014.

[24] N. E. Bickers, D. J. Scalapino, and S. R. White. Conserving approximations for strongly fluctuating electron systems. i. formalism and calculational approach. *Physical Review Letters*, 62(8):961–964, 1989.

[25] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, 124(1):41–53, 1961.

[26] E. Müller-Hartmann. The hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 76(2):211–217, Jun 1989.

[27] Walter Metzner and Dieter Vollhardt. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 62:324–327, 1989.

[28] Dieter Vollhardt. Strong-coupling approaches to correlated fermions. In R. A. Broglia, J. R. Schrieffer, and P. F. Bortignon, editors, *Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", CXXI Course, Varenna on Lake Como, 7–17 July 1992: Perspectives in Many-Particle Physics*, pages 31–94. North-Holland, Amsterdam, 1994.

[29] Joel Bobadilla, Marcelo J. Rozenberg, and Alberto Camjayi. Magnetoresistivity in the antiferromagnetic hubbard model. *Phys. Rev. B*, 112:125144, Sep 2025.

[30] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.

[31] I.M. Lifshitz. The energy spectrum of disordered systems. *Advances in Physics*, 13(52):483–536, 1964.

[32] V. Dobrosavljević and G. Kotliar. Strong correlations and disorder in d=$\infty$ and beyond. *Phys. Rev. B*, 50:1430–1449, Jul 1994.

[33] E. Miranda and V. Dobrosavljević. Dynamical mean-field theories of correlation and disorder. In *Conductor-Insulator Quantum Phase Transitions*. Oxford University Press, 06 2012.

[34] V. Dobrosavljević. Typical medium theory of mott-anderson localization. *International Journal of Modern Physics B*, 24(12n13):1680–1726, 2010.

[35] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić. Typical medium theory of anderson localization: A local order-parameter approach to strong-disorder effects. *Europhysics Letters*, 62(1):76–82, April 2003. Published 1 April 2003; received 31 July 2002, accepted 30 January 2003.

[36] V. Dobrosavljević and G. Kotliar. Mean field theory of the mott-anderson transition. *Phys. Rev. Lett.*, 78:3943–3946, May 1997.

[37] V. Dobrosavljević and G. Kotliar. Dynamical mean-field studies of metal–insulator transitions. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 356(1735):57–74, January 1998.

[38] M. Jarrell and J. E. Gubernatis. Bayesian inference and the analytic continuation of

imaginary-time quantum monte carlo data. *Physics Reports*, 269:133–195, 1996. Review on Maximum Entropy method.

[39] Ryan Levy. Maximum entropy method of analytic continuation: Applications and improvements. B.sc. thesis, University of Michigan, 2016. Honors thesis, Department of Physics.

[40] R. K. Bryan. Maximum entropy analysis of oversampled data problems. *European Biophysics Journal*, 18:165–174, April 1990.

[41] Dominic Bergeron, Vasyl Hankevych, Bumsoo Kyung, and A.-M. S. Tremblay. Optical and dc conductivity of the two-dimensional hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point, including vertex corrections. *Physical Review B*, 84(8):085128, 2011.

[42] A. J. Millis. Optical conductivity and correlated electron physics. In D. Baeriswyl and L. Degiorgi, editors, *Strong interactions in low dimensions. Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimens*, volume 25 of *Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimens*, pages 195–235. Springer, Dordrecht, 2004.

[43] Th. Pruschke, D. L. Cox, and M. Jarrell. Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B*, 47:3553–3565, Feb 1993.

[44] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich. Antiferromagnetic spintronics. *Nature Nanotechnology*, 11(3):231–241, Mar 2016.

[45] A. Dal Din, O. J. Amin, P. Wadley, and K. W. Edmonds. Antiferromagnetic spintronics and beyond. *npj Spintronics*, 2(1):25, Jul 2024.

[46] J. Železný, H. Gao, K. Výborný, J. Zemen, J. Mašek, Aurélien Manchon, J. Wunderlich, Jairo Sinova, and T. Jungwirth. Relativistic néel-order fields induced by electrical current in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 113:157201, Oct 2014.

[47] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak. Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015005, Feb 2018.

[48] William Thomson. On the electro-dynamic qualities of metals: Effects of magnetization on the electric conductivity of nickel and of iron. *Proceedings of the Royal Society of London*, 8(54):546–550, 1857.

[49] E. Y. Tsymbal and D. G. Pettifor. Perspectives of giant magnetoresistance. In Henry Ehrenreich and Frans Spaepen, editors, *Solid State Physics*, volume 56, pages 113–237. Academic Press, 2001.

[50] Peter A. Grünberg. Nobel lecture: From spin waves to giant magnetoresistance and beyond. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1531–1540, Dec 2008.

[51] Xiaoguang Zhang and William Butler. Theory of giant magnetoresistance and tunneling magnetoresistance. In Yongbing Xu, David D. Awschalom, and Junsaku Nitta, editors, *Handbook of Spintronics*, pages 3–69. Springer Netherlands, Dordrecht, 2016.

[52] Guillom. Diagram showing the results of albert fert's team in 1988 at orsay: Giant magnetoresistance (gmr). `https://commons.wikimedia.org/wiki/File:GMR.svg`, 2006. Licensed under Creative Commons Attribution-ShareAlike 3.0 Unported (CC BY-SA 3.0).

[53] A P Ramirez. Colossal magnetoresistance. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(39):8171, sep 1997.

[54] Y Tokura. Critical features of colossal magnetoresistive manganites. *Reports on Progress in Physics*, 69(3):797, feb 2006.

[55] Elbio Dagotto, Takashi Hotta, and Adriana Moreo. Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation. *Physics Reports*, 344(1):1–153, 2001.

[56] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak. Antiferromagnetic spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015005, Feb 2018.

[57] T. Jungwirth, X. Marti, P. Wadley, and J. Wunderlich. Antiferromagnetic spintronics. *Nature Nanotechnology*, 11(3):231–241, Mar 2016.

[58] A. Dal Din, O. J. Amin, P. Wadley, and K. W. Edmonds. Antiferromagnetic spintronics and beyond. *npj Spintronics*, 2(1):25, Jul 2024.

[59] J. Železný, H. Gao, K. Výborný, J. Zemen, J. Mašek, Aurélien Manchon, J. Wunderlich, Jairo Sinova, and T. Jungwirth. Relativistic néel-order fields induced by electrical current in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 113:157201, Oct 2014.

[60] Th. Pruschke and R. Zitzler. From slater to mott–heisenberg physics: the antiferromagnetic phase of the hubbard model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15(46):7867–7886, nov 2003.

[61] M. Zhu, J. Peng, T. Zou, K. Prokes, S. D. Mahanti, T. Hong, Z. Q. Mao, G. Q. Liu, and X. Ke. Colossal magnetoresistance in a mott insulator via magnetic field-driven insulator-metal transition. *Physical Review Letters*, 116:216401, 2016.

[62] Jak ša Vučičević and Rok Žitko. Universal magnetic oscillations of dc conductivity in the incoherent regime of correlated systems. *Phys. Rev. Lett.*, 127:196601, Nov 2021.

[63] Jian Li, Chen Cheng, Thereza Paiva, Hai-Qing Lin, and Rubem Mondaini. Giant magnetoresistance in hubbard chains. *Phys. Rev. Lett.*, 121:020403, Jul 2018.

[64] S. Acheche, M. Charlebois, R. Nourafkan, and A.-M. S. Tremblay. Orbital effects of a magnetic field on the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B*, 96:235135, 2017.

[65] Wei-Wei Yang, Hong-Gang Luo, and Yin Zhong. Shubnikov–de haas effect in the falicov–kimball model: strong correlation meets quantum oscillation. *New Journal of Physics*, 26(10):103002, 2024.

[66] J. Trastoy, A. Camjayi, J. del Valle, Y. Kalcheim, J.-P. Crocombette, D. A. Gilbert, J. A. Borchers, J. E. Villegas, D. Ravelosona, M. J. Rozenberg, and Ivan K. Schuller. Magnetic field frustration of the metal-insulator transition in $V_2O_3$. *Physical Review B*, 101(24):245109, 2020.

[67] Kristjan Haule. Quantum monte carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base. *Phys. Rev. B*, 75:155113, Apr 2007.

[68] Ryan Levy, J. P. F. LeBlanc, and Emanuel Gull. Implementation of the maximum entropy method for analytic continuation. *Computer Physics Communications*, 215:149–155, 2017.

[69] Debarchan Das, Daniel Gnida, Piotr Wiśniewski, and Dariusz Kaczorowski. Magnetic field-driven quantum criticality in antiferromagnetic $CePtIn_4$. *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, 116(41):20333–20338, 2019.

[70] J. Knapp, L. V. Levitin, J. Nyéki, B. Cowan, J. Saunders, M. Brando, C. Geibel, K. Kliemt, and C. Krellner. Magnetic phase diagram of $YbRh_2Si_2$: The influence of hyperfine interactions. *arXiv preprint*, 2025.

[71] Will J. Hardy, Jiangtan Yuan, Hua Guo, Panpan Zhou, Jun Lou, and Douglas Natelson. Thickness-dependent and magnetic-field-driven suppression of antiferromagnetic order in thin $V_5S_8$ single crystals. *ACS Nano*, 10:5941–5946, 2016.

[72] Koushik Ramadoss, Nirajan Mandal, Xia Dai, Zhong Wan, You Zhou, Leonid Rokhinson, Yong P. Chen, Jiangpin Hu, and Shriram Ramanathan. Sign reversal of magnetoresistance in a perovskite nickelate by electron doping. *Physical Review B*, 94(23):235124, 2016.

[73] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. Oxford University Press, Oxford, UK, 2004.

[74] A. Amaricci, G. Sordi, and M. J. Rozenberg. Non-fermi-liquid behavior in the periodic anderson model. *Phys. Rev. Lett.*, 101:146403, 2008.

[75] A. Maignan, O. I. Lebedev, G. Van Tendeloo, C. Martin, and S. Hébert. Negative magnetoresistance in a $V^{3+}/V^{4+}$ mixed valent vanadate. *Applied Physics Letters*, 96:232502, 2010.

[76] Zhaoguo Li, Yuechuan Luo, Jia Li, and Jicheng Zhang. Spin-related negative magnetoresistance in germanium films. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 42(2):023422, 2024.

[77] Qing Li, Chengping He, Jin Si, Xiyu Zhu, Yue Zhang, and Hai-Hu Wen. Absence of superconductivity in bulk $Nd_{1-x}Sr_xNiO_2$. *Communications Materials*, 1:16, 2020.

[78] Joynarayan Mukherjee, T. S. Suraj, Himalaya Basumatary, K. Sethupathi, and Karthik V. Raman. Sign reversal of anomalous hall conductivity and magnetoresistance in cubic noncollinear antiferromagnet $Mn_2Pt$ thin films. *Physical Review Materials*, 5:014201, 2021.

[79] Laurent Laloux, Antoine Georges, and Werner Krauth. Effect of a magnetic field on mott-hubbard systems. *Physical Review B*, 50(5):3092–3108, 1994.

[80] Huan-Cheng Chen, Zhe-Feng Lou, Yu-Xing Zhou, Qin Chen, Bin-Jie Xu, Shui-Jin Chen, Jian-Hua Du, Jin-Hu Yang, Hang-Dong Wang, and Ming-Hu Fang. Negative magnetoresistance in antiferromagnetic topological insulator $EuSn_2As_2$. *Chinese Physics Letters*, 37(4):047201, 2020.

[81] Peter T. Brown, Debayan Mitra, Elmer Guardado-Sanchez, Peter Schauß, Stanimir S. Kondov, Ehsan Khatami, Thereza Paiva, Nandini Trivedi, David A. Huse, and Waseem S. Bakr. Spin-imbalance in a 2d fermi-hubbard system. *Science*, 357(6358):1385–1388, 2017.

[82] A. V. Vedyaev. Use of spin-polarized current in spintronics. *Physics-Uspekhi*, 45(12):1296–1298, 2002.

[83] Koichiro Inomata, Naomichi Ikeda, Nobuki Tezuka, Ryogo Goto, Satoshi Sugimoto, Marek Wojcik, and Eva Jedryka. Highly spin-polarized materials and devices for spintronics*. *Science and Technology of Advanced Materials*, 9(1):014101, 2008. PMID: 27877927.

[84] Soho Shim, M. Mehraeen, Joseph Sklenar, Steven S.-L. Zhang, Axel Hoffmann, and Nadya Mason. Spin-polarized antiferromagnetic metals. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 16:103–120, 2025.

[85] Zhenzhou Guo, Xiaotian Wang, Wenhong Wang, Gang Zhang, Xiaodong Zhou, and Zhenxiang Cheng. Spin-polarized antiferromagnets for spintronics. *Advanced Materials*, 37(36):2505779, 2025.

[86] K. Held, M. Ulmke, and D. Vollhardt. Metamagnetism and phase separation in the hubbard model. *Physical Review B*, 56(21):14469–14472, 1997.

[87] Daniel P. Arovas, Erez Berg, Steven A. Kivelson, and Srinivas Raghu. The hubbard model. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 13:239–274, 2022.

[88] E. P. Wohlfarth and P. Rhodes. Collective electron metamagnetism. *Philosophical Magazine*, 7(83):1817–1824, 1962.

[89] E. Stryjewski and N. Giordano. Metamagnetism. *Advances in Physics*, 26(5):487–650, 1977.

[90] J. M. Kincaid and E. G. D. Cohen. Phase diagrams of liquid helium mixtures and metamagnets: experiment and mean field theory. *Physics Reports*, 22(2):57–143, 1975.

[91] P. H. E. Meijer and C. W. Stamm. Phase diagram and critical points for a metamagnetic ising model using constant coupling approximation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 90(1):77–96, 1978.

[92] M. Žukovič and T. Idogaki. Monte carlo study of the tricritical point stability in a three-dimensional ising metamagnet. *Physical Review B*, 61(1):50–55, 2000.

[93] Da-Jiang Liu. Tricritical behavior of an ising metamagnet in longitudinal and transverse magnetic fields. *physica status solidi (b)*, 244(1):257–266, 2007.

[94] F. Wu, C. Y. Guo, Y. Chen, H. Su, A. Wang, M. Smidman, and H. Q. Yuan. Magnetic field induced antiferromagnetic tricritical points in $Ce_2Sb$ and $Ce_2Bi$. *Phys. Rev. B*, 99:064419, Feb 2019.

[95] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 1999.

[96] Piers Coleman and Andrew J. Schofield. Quantum criticality. *Nature*, 433(7023):226–229, 2005.

[97] S. B. Roy, G. K. Perkins, M. K. Chattopadhyay, A. K. Nigam, K. J. S. Sokhey, P. Chaddah, A. D. Caplin, and L. F. Cohen. First order magnetic transition in doped $cefe_2$ alloys: Phase coexistence and metastability. *Phys. Rev. Lett.*, 92:147203, Apr 2004.

[98] H. Kuwahara, Y. Tomioka, A. Asamitsu, Y. Moritomo, and Y. Tokura. A first-order phase transition induced by a magnetic field. *Science*, 270(5238):961–963, nov 1995.

[99] K. Kamishima, T. Goto, N. Miura, M. Ohashi, N. Mori, T. Sasaki, K. Matsubayashi, and Y. Uwatoko. Giant magnetoresistance in the intermetallic compound Mn3GaC. *Phys. Rev. B*, 63:024426, Dec 2000.

[100] J. Kudrnovský, V. Drchal, and I. Turek. Physical properties of ferh alloys: The antiferromagnetic to ferromagnetic transition. *Phys. Rev. B*, 91:014435, Jan 2015.

[101] Paul Foulquier, Marcello Civelli, Marcelo J. Rozenberg, Alberto Camjayi, Joel Bobadilla, Dorothée Colson, Anne Forget, Pierre Thuéry, François Bertran, Patrick Le Fèvre, and Véronique Brouet. Evolution of the spectral lineshape at the magnetic transition in

Sr_2IrO_4 and Sr_3Ir_2O_7. *The European Physical Journal B*, 96(42):1–12, 2023. Published online 5 April 2023.

[102] Davis Unruh, Alberto Camjayi, Chase Hansen, Joel Bobadilla, Marcelo J. Rozenberg, and Gergely T. Zimányi. Disordered Mott–Hubbard physics in nanoparticle solids: Transitions driven by disorder, interactions, and their interplay. *Nano Letters*, 20(12):9405–9412, 2020.

[103] C. Martins, B. Lenz, L. Perfetti, V. Brouet, F. Bertran, and S. Biermann. Nonlocal coulomb correlations in pure and electron-doped $sr_2iro_4$: Spectral functions, fermi surface, and pseudogap-like spectral weight distributions from oriented cluster dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. Mater.*, 2:032001, 2018.

[104] A. Moutenet, A. Georges, and M. Ferrero. Pseudogap and electronic structure of electron-doped $sr_2iro_4$. *Phys. Rev. B*, 97:155109, 2018.

[105] H. Zhang, K. Haule, and D. Vanderbilt. Effective $j = 1/2$ insulating state in ruddlesden–popper iridates: an lda+dmft study. *Phys. Rev. Lett.*, 111:246402, 2013.

[106] J. Jeong, B. Lenz, A. Gukasov, X. Fabrèges, A. Sazonov, V. Hutanu, A. Louat, D. Bounoua, C. Martins, S. Biermann, V. Brouet, Y. Sidis, and P. Bourges. Magnetization density distribution of $sr_2iro_4$: deviation from a local $j_{\text{eff}} = 1/2$ picture. *Phys. Rev. Lett.*, 125:097202, 2020.

[107] M. V. Kovalenko, L. Manna, A. Cabot, Z. Hens, D. V. Talapin, C. R. Kagan, V. I. Klimov, A. L. Rogach, P. Reiss, D. J. Milliron, P. Guyot-Sionnest, G. Hodes, C. L. K. M. Hermans, P. M. Mulvaney, L. M. Scherf, and A. P. Alivisatos. Prospects of nanoscience with nanocrystals. *ACS Nano*, 9(2):1012–1057, 2015.

[108] D. V. Talapin, J.-S. Lee, M. V. Kovalenko, and E. V. Shevchenko. Prospects of colloidal nanocrystals for electronic and optoelectronic applications. *Chemical Reviews*, 110(1):389–458, 2010.

[109] A. J. Nozik. Quantum dot solar cells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 14(1-2):115–120, 2002.

[110] P. V. Kamat. Quantum dot solar cells. semiconductor nanocrystals as light harvesters. *The Journal of Physical Chemistry C*, 112(48):18737–18753, 2008.

[111] Y. Shirasaki, G. J. Supran, M. G. Bawendi, and V. Bulović. Emergence of colloidal quantum-dot light-emitting technologies. *Nature Photonics*, 7(1):13–23, 2013.

[112] Y. Liu, J. Tolentino, M. Gibbs, R. Ihly, C. L. Perkins, Y. Liu, N. Crawford, J. C. Hemminger, and M. Law. Pbse quantum dot field-effect transistors with air-stable electron mobilities above 7 $\text{cm}^2\,\text{v}^{-1}\,\text{s}^{-1}$. *Nano Letters*, 13(4):1578–1587, 2013.

[113] M. Cargnello, A. C. Johnston-Peck, B. T. Diroll, E. Wong, B. Datta, D. Damodhar, V. V. Doan-Nguyen, A. A. Herzing, C. R. Kagan, and C. B. Murray. Substitutional doping in nanocrystal superlattices. *Nature*, 524(7566):450–453, 2015.

[114] T. Chen, K. V. Reich, N. J. Kramer, H. Fu, U. R. Kortshagen, and B. I. Shklovskii. Metal–insulator transition in films of doped semiconductor nanocrystals. *Nature Materials*, 15(3):299–303, 2016.

[115] J.-H. Choi, A. T. Fafarman, S. J. Oh, D.-K. Ko, D. K. Kim, B. T. Diroll, S. Muramoto, J. G. Gillen, C. B. Murray, and C. R. Kagan. Bandlike transport in strongly coupled and doped quantum dot solids: A route to high-performance thin-film electronics. *Nano Letters*, 12(5):2631–2638, 2012.

[116] E. Talgorn, Y. Gao, M. Aerts, L. T. Kunneman, J. M. Schins, T. Savenije, M. A. van Huis, H. S. J. van der Zant, A. J. Houtepen, and L. D. A. Siebbeles. Unity quantum yield of photogenerated charges and band-like transport in quantum-dot solids. *Nature Nanotechnology*, 6(11):733–739, 2011.

[117] C. Delerue and M. Lannoo. *Nanostructures: Theory and Modeling*. Springer-Verlag, Berlin, 2004.

[118] M. S. Kang, A. Sahu, D. J. Norris, and C. D. Frisbie. Size- and temperature-dependent charge transport in pbse nanocrystal thin films. *Nano Letters*, 11(9):3887–3892, 2011.

[119] J. M. An, A. Franceschetti, S. V. Dudiy, and A. Zunger. The peculiar electronic structure of pbse quantum dots. *Nano Letters*, 6(12):2728–2735, 2006.